

The roughening transition of interfaces in disordered media

Diploma thesis

Uwe Müssel

Institut für Theoretische Physik, Universität zu Köln, Zùlpicher Str. 77, 50937 Köln, Germany

Abstract

Competing pinning effects on a D -dimensional interface by weak impurity disorder and a periodic potential of the underlying crystal lattice are analyzed for $2 < D < 4$. We use both the Gaussian variational method (GVM) and the functional renormalization group $\epsilon = 4 - D$ expansion (FRG) which yield different phase diagrams: Whereas the FRG always predicts a rough phase with irrelevant lattice pinning, the GVM in combination with a three parameter RG for the random potential [T. Nattermann, H. Leschhorn, Europhys. Lett. **16** (1991) 603] leads to a roughening transition of first order. For random bond disorder we compute self-consistently the effective lattice potential.

Der Rauigkeitsübergang von Grenzflächen in ungeordneten Medien

Diplomarbeit

von

Uwe Müssel

Institut für Theoretische Physik
Universität zu Köln

Dezember 1996

Inhaltsverzeichnis

Einleitung	1
1 Das Modell	3
1.1 Ein Oberflächenmodell am Beispiel des Ising-Modells	3
1.2 Die Oberflächenrauhigkeit	8
1.3 Die Behandlung von Systemen mit Unordnung	8
1.4 Bekannte Resultate	9
1.4.1 Elastische Grenzfläche	10
1.4.2 Sinus-Gordon Modell	11
1.4.3 Elastische Oberfläche in Ungeordneten Systemen	11
1.5 Skalenargumente	12
1.5.1 Das Imry Ma Argument	12
1.5.2 Das Flory Argument	13
1.6 Skalierung	16
1.7 Funktionale Renormierungsgruppe	17
1.8 Fixpunkte der Flußgleichungen	24
2 Variationsrechnung	27
2.1 Drei-Parameter-Approximation	30
2.2 Auswertung der Selbstkonsistenzgleichung	35
3 Zusammenfassung	43
Anhang	45
1.1 Das Variations-Funktional	45
1.2 Erwartungswert von $\cos(2\pi z/a)$	46

INHALTSVERZEICHNIS

1.3	Matrixinversion	47
	Literaturverzeichnis	48

Einleitung

Oberflächen und Grenzflächen spielen in der gesamten (naturwissenschaftlichen) Welt eine große Rolle. Beispiele hierzu gibt es aus der Biologie, der Chemie und, was uns besonders interessiert, aus der Physik. Der wichtigste Vertreter aus der Biologie ist die Zellmembran, die es überhaupt ermöglicht, das es Leben gibt. Aus der Chemie ist sicherlich der Katalysator ein wichtiges Beispiel, den wir alle aus dem Auto kennen. Er beschleunigt chemische Reaktionen, indem er, durch Anlagerung der Schadstoffe an der Oberfläche, es erleichtert, deren chemische Bindungen aufzubrechen. So können neue, weniger schädliche Stoffe entstehen. Sein Wirkungsgrad ist proportional zur effektiven Oberflächengröße.

Aus der physikalischen Sicht ist eine Oberfläche ein Objekt, welches zwei Teile eines Systems voneinander separiert. Die Dimension der Oberfläche ist immer um eins kleiner als die des zugrundeliegenden Raumes. Die Mathematiker sprechen in einem solchen Fall von einer Hyperfläche. Beispiele gibt es ebenso unterschiedliche, wie zahlreiche: So gibt es “gewöhnliche” Oberflächen wie die Begrenzungen eines Festkörpers. Die Grenze zwischen zwei koexistierenden Phasen ist ebenfalls eine Oberfläche.

Die Physik an der Oberfläche unterscheidet sich vielfach von der in dem dazugehörigen Volumen. Bei Festkörpern kommt es vor, daß das Gitter an der Oberfläche einen andere Struktur hat. Im einfachsten Fall hat die oberste Atomlage einen anderen Gitterabstand senkrecht zur ihrer Ausbreitungsrichtung, als die Lagen tief im inneren des Kristalls. Im Extremfall besitzt die Oberfläche eine veränderte Gitterstruktur, indem sie eine Überstruktur ausbildet. Man spricht von einer Rekonstruktion der Oberfläche, bei der die Gitterkonstante parallel zur Oberfläche ein Vielfaches der Gitterkonstante im Volumen ist. Zudem kann dieses in vershienen Richtungen ein unterschiedliches Vielfaches sein. Die Bandstruktur der Oberfläche unterscheidet sich ebenfalls von der im Volumen. Somit ändern sich auch die elektronischen Eigenschaften.

Die modernen experimentellen Methoden ermöglichen es heute eine atomare Oberfläche direkt zu beobachten. Speziell erwähnt seien hier das Raster-Tunnelelektronen-Mikroskop und das Raster-Kraft-Mikroskop. Ersteres erlaubt es die elektronische Struktur der Oberfläche mithilfe eines Tunnelstroms, der durch eine winzige, im idealen Fall einatomige Spitze fließt, abzutasten. Das Raster-Kraft-Mikroskop tastet die Oberfläche direkt mit einer Spitze ab und gibt somit Aufschluß über den atomaren Aufbau.

In dieser Arbeit geht es darum einen der vielen Aspekte, welche eine Oberfläche besitzt, etwas genauer zu beleuchten. Wir wollen deren Rauhigkeit betrachten. Es handelt sich

dabei um eine Gleichgewichtseigenschaft. Diese Eigenschaft hat auch ihre Auswirkungen auf Nichtgleichgewichtsphänomene. Als Beispiele seien hier getriebene Grenzflächen, das Aufdampfen, auch bekannt unter dem englischen Namen Molecular Beam Epitaxy (MBE), oder allgemeiner das Kristallwachstum genannt.

Das hier betrachtete Modell ist nicht nur als Oberflächenmodell interessant. Das reine Modell gehört zu einer ganzen Gruppe von 2-dimensionalen Modellen, die sich aufeinander abbilden lassen, wie das *XY – Modell* und das Coulombgas. Weiterhin gibt es mit diesem Modell verwandte Probleme. Die Oberfläche beschreiben wir durch ein skalares Feld, welchen durch einen in der Ebene liegenden Vektor beschrieben wird. Ändern wir die Dimension dieses Parametervektors z.B. auf den Wert eins und verwenden wir ein zweikomponentiges Feld, so erhalten wir die Beschreibung eines gerichteten Polymeres. Mit einem ganzen Ensemble solcher Linien kann man das Flußliniengitter eines Typ II Supraleiters in der Abrikosov-Phase beschreiben. Als eine andere Variation kann man ein Ensemble von Grenzflächen betrachten, womit wir bei der Theorie der kommensurablen Systeme angekommen sind.

Die Arbeit gliedert sich folgendermaßen: Zunächst wird ein Modell motiviert, mit dem man Oberflächen beschreiben kann. Es wird auf einige bekannte Resultate von verwandten Modellen eingegangen. Im darauffolgenden Kapitel wird das Modell mithilfe der Renormierungsgruppe untersucht. Im Rahmen einer ϵ -Entwicklungen werden Flußgleichungen gewonnen, aus denen wir erste Resultate gewinnen. Danach folgt eine Behandlung mittels eines Variationsverfahrens. Hierbei wird eine Abwandlung der Renormierungsgruppe aus dem vorangehenden Kapitel verwendet, die Drei-Parameter-Approximation. Schließlich folgt ein Kapitel, in dem eine Methode vorgestellt wird, mit der man auch in der ursprünglichen Renormierungsgruppe zu einem Phasenübergang gelangen kann.

Für die Beschreibung einer Oberfläche hat man zwei Möglichkeiten. Die eine besteht darin, alles auf einer atomaren Längenskala zu betrachten. Hierbei wird die Position eines jeden Atoms angegeben. Ein bekanntes Beispiel für diese Art der Beschreibung sind das Solid on Solid (SOS) Modell. Die andere Möglichkeit ist, über kleine Bereiche zu mitteln und somit zu einer Kontinuumsbeschreibung überzugehen. Der zweite Zugang wird in dieser Arbeit angewendet.

Kapitel 1

Das Modell

1.1 Ein Oberflächenmodell am Beispiel des Ising-Modells

Als Ausgangspunkt für unsere Betrachtungen wählen wir das Ising-Modell auf einem Quadratgitter. Wir stellen uns vor, daß auf jedem Gitterpunkt ein Spin mit zwei Einstellmöglichkeiten sitzt, der Einfachheit halber $s = \pm 1$. Diese Spins können nun jeweils mit ihren nächsten Nachbarn wechselwirken. Die Stärke der Wechselwirkung wird durch eine Kopplungskonstante J beschrieben. Die Hamiltonfunktion für ein reines System, das heißt ein System, wo die Kopplungskonstanten zwischen den nächsten Nachbarn alle gleich groß sind, hat damit die folgende Gestalt

$$\mathcal{H}_{\text{Ising}} = - \sum_{\langle i,j \rangle} J s_i s_j.$$

$\langle i, j \rangle$ deutet an, daß nur über nächste Nachbarn summiert wird, wobei jedes Paar nur einmal gezählt wird. (Anderenfalls müßte man den Faktor $1/2$ ergänzen.)

Für dieses System gibt es nun zwei Fälle mit je zwei entarteten Grundzustandskonfigurationen, d.h. Konfigurationen mit minimaler Energie E . Die $T = 0$ Konfigurationen sind diese Grundzustandskonfigurationen. Ist die Kopplungskonstante $J > 0$, so richten sich die Spins parallel zueinander aus. Dieses ist der ferromagnetische Fall. Der Grundzustand ist zweifach entartet, da das System noch die Möglichkeit hat, alle Spins nach oben oder nach unten zeigen zu lassen. Bei $J < 0$, dem antiferromagnetischen Fall, sind benachbarte Spins entgegengesetzt ausgerichtet. Das Gitter besteht aus zwei Untergittern, in denen jeweils die Spins parallel ausgerichtet sind. Auch hier gibt es zwei mögliche Konfigurationen, entweder zeigen in dem einen Untergitter die Spins nach oben und in dem anderen nach unten oder eben umgekehrt. Wir betrachten im folgenden den Ferromagneten.

Vom Ising-Modell ist bekannt, daß es in zwei und mehr Dimensionen einen Phasenübergang besitzt [14]. Unterhalb der kritischen Temperatur T_c ist die Magnetisierung, das ist der thermisch gemittelte Erwartungswert des Spins, ungleich null, oberhalb gleich null. Der

Phasenübergang ist von zweiter Ordnung, das heißt die Magnetisierung verschwindet kontinuierlich. Starten wir zum Beispiel bei $T = 0$ und erhöhen die Temperatur, so findet ein in der statistischen Physik immer wieder auftretender Prozeß statt. Das Gleichgewicht ist durch das absolute Minimum der Freien Energie $\mathcal{F} = E - TS$ bestimmt (S ist die Entropie). Einige Spins drehen sich um, wodurch sich die Energie des Systems erhöht. Auf der anderen Seite gewinnt das System aber an Entropie, da diese Spins an beliebigen Plätzen im System liegen können. Mit wachsender Temperatur bilden sich aus vereinzelt ‘verkehrt’ stehenden Spins kleine Bereiche, sogenannte Domänen. Der typische Durchmesser dieser Domänen, welchen man als die *Korrelationslänge* bezeichnet, wächst, bis er bei T_c die Systemgröße erreicht. Genauer muß man sagen, da es einen Phasenübergang nur im thermodynamischen Limes gibt, daß die Korrelationslänge bei T_c divergiert. Unter dem thermodynamischen Limes versteht man, daß man die Systemgröße gegen Unendlich gehen läßt, wobei man die Dichten des Systems konstant hält.

Was uns nun interessiert sind die Begrenzungen dieser Domänen, die sogenannten Domänenwände. Für sie wollen wir eine geeignete Hamiltonfunktion aufstellen und damit deren Eigenschaften untersuchen. Zunächst machen wir uns ein paar Gedanken über die Energie einer solchen Wand. Die Wand befindet sich genau da, wo die Spins entgegengesetzt stehen. Im Vergleich zu parallel ausgerichteten Spins ist die Energie an solchen Stellen um $2 \cdot J$ größer. Die Anzahl solcher *gebrochener* Bindungen ist proportional zur Fläche dieser Wand. Somit setzen wir die Energie der Wand als eine Flächenenergiedichte multipliziert mit der Fläche der Wand an.

Was wir noch benötigen ist eine geeignete Parametrisierung der Domänenwände. In dem oben beschriebenen System ist dieses mathematisch sehr kompliziert. Wir wollen uns daher auf eine einzige Domänenwand beschränken. Eine solche Wand kann man im Ising-Modell erzwingen, in dem man in einer Raumrichtung antiperiodische Randbedingungen fordert. Diese ausgezeichnete Richtung wollen wir im folgenden als die z -Richtung bezeichnen. Durch diese Randbedingung muß das System im Verlauf der z -Richtung die Spinrichtung wechseln. Im Grundzustand wird eine völlig ebene Wand vorliegen. Eine solche Wand läßt sich nun einfach durch orthogonale Koordinaten parametrisieren (Abbildung 1.1). Die $D := d - 1$ Koordinaten, entlang der Achsen senkrecht zur z -Richtung bezeichnen wir mit dem Vektor \vec{x} , die entlang der z -Achse mit z . Die zu untersuchende Fläche läßt sich nun als Feld $z(\vec{x})$ beschreiben. Die Punkte der Fläche haben demnach die Koordinaten $(\vec{x}, z(\vec{x}))$. Hierbei bezeichnen wir mit d die Dimension des ganzen Raumes und mit D die Dimension der Fläche. Eine Fläche, welche so parametrisiert ist, bezeichnet man als eine gerichtete Fläche.

Den Preis, welchen man für diese einfache Parametrisierung zu zahlen hat, ist, daß man mit ihr keine Überhänge oder Einschlüsse beschreiben kann. Die Frage ist nun, ob dieses unsere Betrachtungen wesentlich beeinflusst. Wir gehen zu einer vergrößerten Beschreibung (coarse graining) des Systems über, das heißt, wir fassen einen ausgedehnten Bereich der Oberfläche zusammen und summieren über die Fluktuationen in diesem Bereich. Wenn wir diesen Bereich groß genug wählen, so werden die Überhänge und Einschlüsse herausgemittelt. Wir erreichen hierdurch eine Kontinuumsbeschreibung der Oberfläche. Der Einfluß der

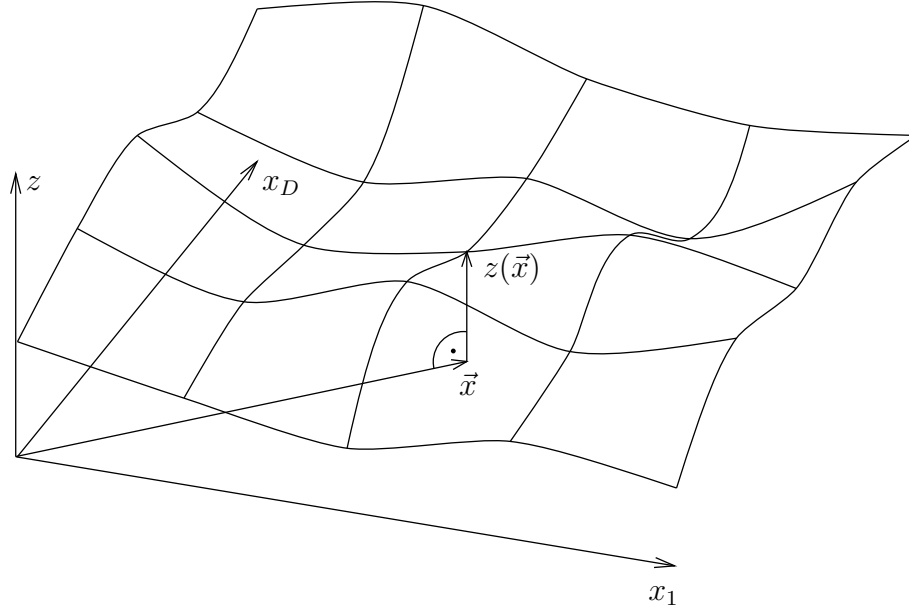


Abbildung 1.1: Die Koordinaten einer gerichteten Fläche: der Parametervektor \vec{x} spannt eine D -dimensionale Hyperebene auf; das Feld $z(\vec{x})$ beschreibt das Höhenprofil der Oberfläche über dieser Hyperebene

Einschlüsse und Überhänge schlägt sich nun in einer effektiven Energiedichte der Oberfläche nieder.

Wir können nun den ersten Beitrag zur Hamiltonfunktion aufschreiben.

$$\mathcal{H}_{\text{el}} \propto \int d^D x \, \Gamma \sqrt{1 + (\nabla z(\vec{x}))^2}$$

Γ ist die Oberflächensteifigkeit (oder Oberflächenspannung). Das Integral über den Wurzelausdruck ist die Fläche der Wand. Für kleine Gradienten kann man diesen Ausdruck nun nach $(\nabla z(\vec{x}))^2$ entwickeln. In der niedrigsten Ordnung erhält man

$$\mathcal{H}_{\text{el}} \propto \int d^D x \, \frac{\Gamma}{2} (\nabla z(\vec{x}))^2. \quad (1.1)$$

Hierbei haben wir den Konstanten Term weggelassen. Dieser beeinflusst nur die Grundzustandsenergie und hat somit keinen Einfluß auf einen Phasenübergang.

Bis hierher bezogen sich unsere Betrachtungen auf ein reines System. Im folgenden wollen wir das System derart erweitern, daß wir Unordnung zulassen. Dabei wollen wir zwei verschiedene Arten von Unordnung betrachten, Random Bond und Random Field Unordnung.

Die erste Art der Unordnung kommt dadurch zustande, daß im System an einigen Stellen nichtmagnetische Atome sitzen. Im Ising-Modell modelliert man eine solche Unordnung, indem man die Kopplungskonstante J durch eine Zufallsvariable ersetzt.

$$J = J_0 + \delta J$$

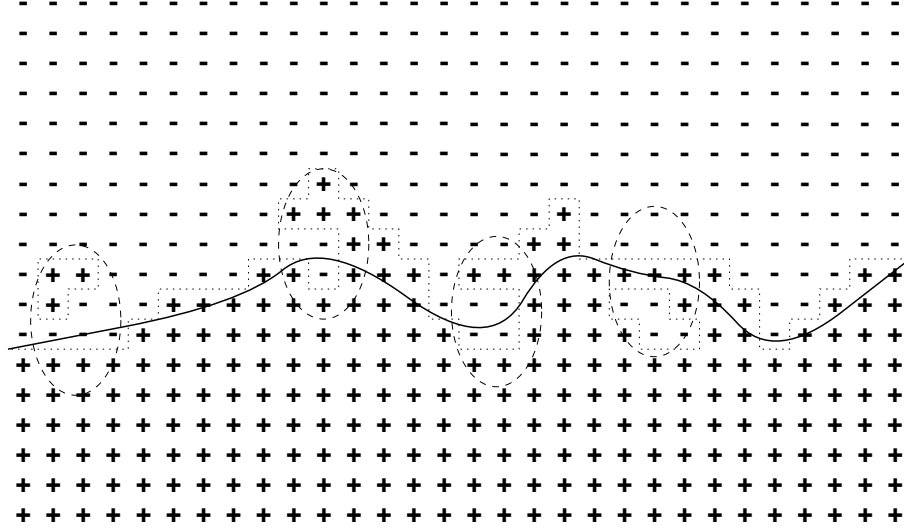


Abbildung 1.2: Veranschaulichung des Vergrößerungsprozesses: Auf jedem Gitterpunkt sitzt ein Spin, der entweder nach oben (+) oder nach unten (−) zeigt. Die Grenze zwischen Bereichen + und − ist die zu untersuchende Wand. In dieser Konfiguration gibt es noch Überhänge beziehungsweise Einschlüsse. Um diese zu beseitigen, mittelt man über kleinere aber hinreichend große Bereiche (exemplarisch dargestellt durch die gestrichelten Ellipsen). Man endet bei einer vergrößerten Beschreibung der Wand, die nun in etwa wie die durchgezogene wellige Linie aussieht.

J_0 ist hier eine Konstante, etwa die Kopplungskonstante des reinen Systems. δJ ist eine Zufallsvariable, welche von Ort zu Ort einen anderen Wert besitzt. Ihr Mittelwert ist $\overline{\delta J} = 0$. Übersetzen wir dieses nun in die Formulierung unserer Oberflächenhamiltonfunktion, so wird die Oberflächenspannung Γ eine Zufallsgröße

$$\mathcal{H} \propto \int d^D x (\Gamma + \delta\Gamma(\vec{x}, z(\vec{x}))) \sqrt{1 + (\nabla z(\vec{x}))^2}.$$

Wir entwickeln hier nun wieder bis zur ersten Ordnung in $\delta\Gamma$ und $(\nabla z)^2$.

$$\mathcal{H} \propto \int d^D x \frac{1}{2} \Gamma (\nabla z(\vec{x}))^2 + \delta\Gamma(\vec{x}, z(\vec{x})).$$

Bei der zweiten Art der Unordnung, der Random Field Unordnung, befindet sich das System in einem Zufallsfeld, einem Feld, welches an jedem Ort im Raum einen zufälligen Wert annimmt. Dieses bedeutet, daß jeder Spin ein zufälliges ‘äußeres’ Feld sieht. Im Ising-Modell erhält man hierdurch den zusätzlichen Energiebeitrag $\sum_i H_i s_i$, wobei H_i das Feld ist, welches der Spin auf dem i -ten Platz sieht. Die Hamiltonfunktion der Wand erhält den Zusatz

$$\mathcal{H}_{\text{RF}} = \int d^D x \int_0^{z(\vec{x})} dz' H(\vec{x}, z') = \int d^D x U(\vec{x}, z(\vec{x})).$$

Bezeichnen wir nun im Random Bond Fall den Term $\delta\Gamma(\vec{x}, z)$ mit $U(\vec{x}, z)$, so haben wir in beiden Fällen dieselbe Gestalt der Hamiltonfunktion. Zusammen mit dem elastischen Anteil lautet sie

$$\mathcal{H}_{\text{ungeordnet}} = \int d^D x \frac{\Gamma}{2} (\nabla z(x))^2 + U(\vec{x}, z(\vec{x})). \quad (1.2)$$

Zwischen den beiden Arten der Unordnung unterscheidet man durch die Art des Unordnungskorrelators. Die Random Bonds sind voneinander unabhängig, also unkorreliert. Ihr Korrelator ist somit lokal. Die Random Fields sind ebenfalls voneinander unabhängig verteilt, woraus auch hier ein lokaler Korrelator für das Feld $H(\vec{x}, z)$ folgt. Durch die Integration in z -Richtung wird der Korrelator von $U(\vec{x}, z(\vec{x}))$ in dieser Richtung nichtlokal. Er verhält sich für große Differenzen wie $-|z - z'|$.

Zusammengefaßt erhält man für beide Unordnungen

$$\overline{U(\vec{x}, z)U(\vec{x}', z')} = \delta(\vec{x} - \vec{x}')R(z - z'),$$

wobei die Art der Unordnung durch die Funktion $R(z)$ unterschieden wird. Sie hat in den beiden Fällen die Gestalt

$$\begin{aligned} R_{\text{RB}}(z) &\propto \delta(z) \\ R_{\text{RF}}(z) &\propto -|z|. \end{aligned}$$

Die Unordnung verändert das Verhalten des Systems dramatisch. Ist es im Fall rein Thermischer Fluktuationen so, daß die Energie der Wand nur zu deren Fläche proportional ist, so kommt nun noch ein Beitrag durch die Unordnung hinzu. Die Energie kann nun abgesenkt werden, indem die Wand sich bevorzugt an solchen Stellen befindet, wo die Kopplungskonstante zwischen den einzelnen Spins besonders klein ist. Der Grundzustand ergibt sich nun aus der Konkurrenz der beiden Energieterme, insbesondere muß er nicht mehr vollständig eben sein, wie im reinen Fall.

Wir wollen nun in unsere Hamiltonfunktion noch einen dritten Term einfügen. Durch die Kontinuumsbeschreibung des Problems ist eine Eigenschaft des Systems verlorengegangen, nämlich die Tatsache, daß die Position der Wand immer zwischen den Spins liegt und somit diskretisiert ist. Wir wollen dem nun Rechnung tragen, indem wir noch ein zusätzliches periodisches Potential in z -Richtung einfügen. Die Wand möchte bevorzugt in einem Minimum dieses Potentials sitzen. Somit führen wir hiermit die Diskretisierung quasi durch die ‘Hintertür’ wieder ein. Wir haben also den additiven Beitrag zur Energie

$$\mathcal{H}_{\text{per}} = - \int d^D x V_0 \cos\left(\frac{2\pi}{a}z\right)$$

V_0 ist die Amplitude des periodischen Potentials, a der ‘Gitterabstand’ in z -Richtung. Hier ist es nun angebracht, eine Bemerkung zu den Gitterkonstanten zu machen. Wir haben mit dem Ising-Modell auf einem Quadratgitter begonnen. Die Gitterkonstante war dort in

allen Raumrichtungen gleichgroß. Dieses muß nach dem Übergang zum Kontinuumsmodell nicht mehr der Fall sein. Dabei wurden die Fluktuationen der Wand über einen gewissen Bereich der Wand herausgemittelt. Die Abmessungen dieses Bereiches in den \vec{x} -Richtungen müssen nicht genau so groß sein wie die in die z -Richtung. Wir wollen daher zwischen zwei Gitterkonstanten $a_{||}$ und a_{\perp} unterscheiden. Die erste ($a_{||}$) soll die Gitterkonstante parallel zur Oberfläche, also die in den \vec{x} -Richtungen sein. Sie definiert die kurzwellige Abschneidefrequenz $\Lambda = 1/a_{||}$ der auftretenden Impulse (Ultraviolett-Cutoff). Die andere Gitterkonstante a_{\perp} ist die Periodenweite des periodischen Potentials.

Die gesamte Hamiltonfunktion lautet somit

$$\mathcal{H} = \int d^D x \left\{ \frac{\Gamma}{2} (\nabla z(\vec{x}))^2 - V_0 \cos \left(\frac{2\pi}{a_{\perp}} z \right) + U(\vec{x}, z(\vec{x})) \right\} \quad (1.3)$$

Dieses ist die Beschreibung der Oberfläche, welche den Betrachtungen dieser Arbeit zugrunde liegt.

1.2 Die Oberflächenrauhigkeit

Der Hauptgesichtspunkt dieser Arbeit ist der Rauigkeitsübergang von einer glatten zu einer rauen Oberfläche. Um diesen untersuchen zu können, ist es zunächst einmal notwendig zu definieren, was man unter der Rauigkeit einer Fläche verstehen soll. Eine sinnvolle Größe hierfür sind sicherlich die Fluktuationen der Grenzfläche um ihren Mittelwert. Die Rauigkeit einer Wand (beziehungsweise genauer gesagt deren Quadrat) wird definiert als die mittleren quadratischen Fluktuation der Höhe $z(\vec{x})$ (Höhen-Höhen-Korrelation).

$$W(|\vec{x} - \vec{x}'|) = \overline{[z(\vec{x}) - z(\vec{x}')]^2}^{1/2} \quad (1.4)$$

Wobei $\langle \dots \rangle$ für die thermische Mittelung und der Querstrich für die Unordnungsmittelung steht.

Konvergiert diese Größe für große Abstände $|\vec{x} - \vec{x}'|$ gegen einen endlichen Wert, so handelt es sich um eine glatte Oberfläche. Divergiert die Größe, so ist die Fläche rau. In der rauen Phase verhält sich die Rauigkeit für große $L = |\vec{x} - \vec{x}'|$ wie

$$W(L) \propto L^{\zeta}.$$

Der kritische Exponent ζ heißt *Rauhigkeitsexponent*.

1.3 Die Behandlung von Systemen mit Unordnung

Ein zentraler Punkt bei der Behandlung von ungeordneten Systemen ist die korrekte Handhabung der Unordnung. Insbesondere muß darauf geachtet werden, daß nur geeignete

Größen gemittelt werden. Diese Größen heißen selbstmittelnd. Die Begründung hierfür liegt darin, daß man zwischen dem wahrscheinlichsten Wert und dem Mittelwert einer Größe unterscheiden muß. Der Mittelwert ist der Wert, den man bei einer Mittelung der entsprechenden Größe erhält. Führt man eine Messung an einem realen System durch, so mißt man jedoch den wahrscheinlichsten Wert. Nun gibt es aber auch Zufallsgrößen, bei denen sich der wahrscheinlichste und der mittlere Wert wesentlich unterscheiden. Dieses tritt bei stark asymmetrischen Verteilungsfunktionen auf. Die Berechnung des Mittelwertes solcher Größen ist von sogenannten *seltenen Ereignissen* dominiert. Bei einer Messung haben diese aber quasi keine Bedeutung, da sie eben sehr selten sind.

Eine dieser Größen ist die Freie Energie

$$F = -T \ln \text{Tr} e^{-\frac{\mathcal{H}}{T}} = -T \ln \mathcal{Z}.$$

Hierbei ist die Boltzmannkonstante, wie auch im folgenden, gleich 1 gesetzt.

Um diese Größe über die Unordnung zu mitteln, bedient man sich des sogenannten *Replikatricks*. Zunächst stellt man den Logarithmus als einen Grenzwert dar.

$$\ln x = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{n} (x^n - 1)$$

Die n-te Potenz der Zustandssumme \mathcal{Z}^n wird nun als die Zustandssumme eines n-fach vervielfältigten Systems betrachtet.

$$\mathcal{Z}^n = \left(\text{Tr} e^{-\frac{\mathcal{H}}{T}} \right)^n = \text{Tr}' e^{-\frac{\mathcal{H}_n}{T}}$$

Tr' bedeutet hier, daß die Spur über die Freiheitsgrade des vervielfältigten Systems gebildet wird. Dieses sind n mal so viele Freiheitsgrade, wie im ursprünglichen System. \mathcal{H}_n ist die Hamiltonfunktion des gesamten oder *replizierten* Systems, also aller Teilsysteme. Die Teilsysteme, von denen jedes für sich dem ursprünglichen System entspricht, sind zunächst ungekoppelt. Die Freiheitsgrade der Teilsysteme werden mit der Systemnummer des Teilsystems indiziert z_α , $\alpha = 1..n$. Die Unordnung hingegen ist unabhängig von der Teilsystemnummer oder wie man auch sagt, vom *Replikaindex*. Diese Zustandssumme des replizierten Systems wird nun über die (gaußverteilte) Unordnung gemittelt. Hierdurch entsteht eine Kopplung zwischen den einzelnen Systemen.

Problematisch bei der Anwendung dieses Replikatricks ist, daß hierbei die Bildung des Grenzwertes $\lim_{n \rightarrow 0}$ und der Unordnungsmittelung vertauscht werden. Es ist mathematisch nicht sichergestellt, daß man bei beiden Möglichkeiten denselben Grenzwert erhält. Dieses Problem können wir hier nicht weiter untersuchen und erwähnen es hier nur der Vollständigkeit halber.

1.4 Bekannte Resultate

Das dieser Arbeit zugrundeliegende Problem wurde in dieser Form bereits von Bouchaud und Georges mittels eines Variationsverfahrens untersucht [3]. Sie approximieren dabei die

ganze replizierte Hamiltonfunktion durch einen quadratischen Ausdruck und untersuchen das Problem mit Hilfe der Replikasymmetriebrechung. Für Oberflächendimensionen D größer als zwei (Raumdimensionen d größer als drei) finden sie drei verschiedene Phasen, eine glatte, eine glasartig glatte und eine raue. In $D = 2$ Dimensionen finden sie ebenfalls drei verschiedene ‘Zustände’ des Systems. Auf Grund von heuristischen Argumenten, die einen Phasenübergang in 2 Oberflächendimensionen ausschließen, argumentieren sie, daß die von ihnen gefundenen Grenzlinien Crossoverlinien sein müssen.

Für vereinfachte Modelle gibt es ebenfalls bekannte Resultate. Solche Vereinfachungen bestehen darin, daß man entweder das periodische, das ungeordnete oder auch beide Potentiale wegläßt.

1.4.1 Elastische Grenzfläche

Das einfachste System besteht nur aus dem elastischen Anteil der Hamiltonfunktion.

$$\mathcal{H}_{\text{el}} = \int d^D x \frac{\Gamma}{2} (\nabla z(\vec{x}))^2 \quad (1.5)$$

Dieses Modell ist exakt lösbar, da die Hamiltonfunktion quadratisch im Feld z ist. Die Rauigkeit ergibt sich zu

$$W_{\text{el}}^2(x) = \frac{T}{\Gamma} \int \frac{d^D q}{(2\pi)^D} \frac{1 - e^{i\vec{q}\vec{x}}}{q^2}$$

Die Impulse q im Integral sind nach unten begrenzt durch $1/L$ und nach oben durch $1/a_{\parallel}$. Es gibt hier drei mögliche Fälle zu unterscheiden:

$D > 2$ In diesem Fall nimmt das Integral für $x, L \rightarrow \infty$ einen endlichen Wert an. Die Grenzfläche ist also nach unserer Definition glatt.

$D = 2$ Dieses ist die sogenannte *marginale* Dimension. Das bedeutet, die größte Dimension bei der die Oberfläche für endliche Temperaturen noch rauh ist. Eine typische Eigenschaft der marginalen Dimension ist, daß die Rauigkeit logarithmisch mit dem Abstand x wächst und somit für $x, L \rightarrow \infty$ divergiert

$$W_{\text{el}}^2(x) \propto \ln \left(\frac{x}{a_{\parallel}} \right)$$

$D < 2$ Auch in diesem Fall ist die Oberfläche rauh. Im Vergleich zum vorherigen Fall wächst die Rauigkeit allerdings nach einem algebraischen Gesetz mit dem Abstand x . Dieses ist also wesentlich schneller als im marginalen Fall.

$$W_{\text{el}}^2(x) \propto \frac{T}{\Gamma} L^{2-D}$$

Im zweiten und dritten Fall erhält man nur für $T = 0$ eine glatte Oberfläche. Für endliche T ist die Wand immer rauh. Für den letzten Fall kann man den Rauigkeitsexponenten ζ bestimmen. Er beträgt

$$\zeta_{\text{el}} = \frac{2 - D}{2}. \quad (1.6)$$

1.4.2 Sinus-Gordon Modell

Das nächste Modell ist das Sinus-Gordon Problem. Hierbei setzt sich die Hamiltonfunktion aus dem elastischen Term und dem periodischen Potential zusammen.

$$\mathcal{H}_{\text{el}} = \int d^D x \left\{ \frac{\Gamma}{2} (\nabla z(\vec{x}))^2 - V_0 \cos \left(\frac{2\pi}{a_{\perp}} z(\vec{x}) \right) \right\}$$

Dieses Modell ist nicht mehr exakt zu behandeln. Man muß geeignete Näherungen durchführen, wie zum Beispiel eine Variationsrechnung oder Renormierungsgruppenrechnung [4, 5, 11, 25]. Auch bei diesem Modell ist die marginale Dimension $D = 2$. Im Fall $D > 2$ ist die Wand somit glatt. Für $D = 2$ ändert sich das Verhalten derart, daß es nun einen durch die Temperatur getriebenen Phasenübergang gibt. Unterhalb einer kritischen Temperatur T_c ist die Wand glatt, während sie sich oberhalb in einer rauhen Phase befindet. Die Art des Phasenübergangs fällt in die Universalitätsklasse des Kosterlitz Thoules Übergang.

1.4.3 Elastische Oberfläche in Ungeordneten Systemen

Ein weiteres bekanntes Modell ist die elastische Grenzfläche in einem ungeordneten Medium [7], beschrieben durch die Hamiltonfunktion

$$\mathcal{H} = \int d^D x \left\{ \frac{\Gamma}{2} (\nabla z(\vec{x}))^2 + U(\vec{x}, z(\vec{x})) \right\}.$$

Für Dimensionen $D < 4$ ist dieses System durch einen $T = 0$ Fixpunkt bestimmt. Das System ist durch die Unordnung bedingt selbst bei $T = 0$ rauh. Der kritische Exponent ζ läßt sich mit Hilfe einer funktionalen Renormierungsgruppenrechnung bestimmen. Man erhält in der 1-loop Approximation:

$$\begin{aligned} \zeta_{\text{RF}} &= \frac{4 - D}{3} \\ \zeta_{\text{RB}} &\approx (4 - D) \cdot 0.2083 \end{aligned} \quad (1.7)$$

Der Random Bond Exponent ist ein numerisches Ergebnis.

In einer Dimension ($D = 1$) läßt sich das Problem für Random Bond Unordnung mit Hilfe von Transfermatrizen exakt lösen. Man erhält

$$\zeta = \frac{2}{3}, \quad (1.8)$$

was nicht ganz mit dem numerischen Resultat von Fisher übereinstimmt. Hierbei ist zu beachten, daß die Ergebnisse von Fisher im Rahmen der führenden Ordnung einer ϵ Entwicklung gewonnen wurden ($\epsilon = 4 - D$).

1.5 Skalenargumente

Einen guten Überblick erhält man bereits, wenn man das Skalenverhalten der auftretenden Größen betrachtet. Dabei reskaliert man die auftretenden Längen und Impulse derart, daß man zu größeren Längenskalen übergeht (wir interessieren uns hauptsächlich für das Verhalten auf großen Längen). Durch die Forderung der Invarianz der Hamiltonfunktion oder die Equilibrierung von Energiebeiträgen erhält man die kritischen Exponenten.

Als einführendes Beispiel wollen wir das Modell der elastischen Grenzfläche (1.5) betrachten. Wir betrachten, wie sich die Energie einer Ausbeulung der Oberfläche mit deren Größe ändert. Die Längen parallel zur Oberfläche skalieren wie L . Somit liefert das Integral $\int d^D x$ einen Beitrag L^D . z ist auf dieser Längenskala die Rauigkeit $W(L)$. Der Gradient ∇ liefert eine inverse Längenpotenz L^{-1} . Somit skaliert die gesamte Hamiltonfunktion wie $\Gamma L^{D-2} W^2$. Diese Energie muß von der thermischen Energie aufgebracht werden, wir setzen den Ausdruck also gleich T und lösen nach W auf.

$$W \approx \left(\frac{T}{\Gamma} \right)^{1/2} L^{(2-D)/2}$$

Wir erhalten denselben Rauigkeitsexponenten wie in (1.6) $\zeta = (2 - D)/2$. Auch der Vorfaktor $(T/\Gamma)^{1/2}$ ist derselbe.

1.5.1 Das Imry Ma Argument

Wir wollen nun eine elastische Grenzfläche in einem ungeordneten Medium betrachten und die Energiebeiträge des elastischen Term und der Unordnung equilibrieren. Dieses führt zum *Imry Ma Argument*.

Bei diesem Argument betrachtet man die Beiträge zur Energie bei $T = 0$, die man gewinnt und verliert, wenn man einen Bereich mit dem Durchmesser L einer glatten Oberfläche um eine Distanz W in z -Richtung verformt. Es entsteht dabei ein Energieverlust durch den elastischen Term. Dieser ist genau so groß wie im Fall ohne Unordnung, skaliert also wie $\Gamma L^{D-2} W^2$.

Die Energie, die notwendig ist, um diese Verformung zu realisieren, kann nur durch die Unordnung aufgebracht werden. Das ungeordnete Potential verschwindet im Mittel. Wir müssen also die Fluktuationen derselben betrachten. Weiterhin muß zwischen Random Bond und Random Field Unordnung unterschieden werden. Im ersten Fall gewinnt die Oberfläche an Energie, indem sie möglichst viele Minima des ungeordneten Potentials

erreicht. Die Fluktuationen sind also proportional zur Fläche der Ausbeulung und skalieren somit wie L^D .

Der Mechanismus, durch den die Oberfläche im Random Field Fall Energie gewinnen kann, funktioniert anders. Gebrochene Bindungen haben nur dann eine Auswirkung auf die Energie, wenn sie an der Oberfläche liegen. Im Volumen spielt es keine Rolle, ob die an dieser Bindung liegenden Spins beide nach oben zeigen oder durch die verschobene Oberfläche beide nach unten. Die Random Field Unordnung wirkt auf die Einstellung eines jeden Spins und nicht auf die relative Einstellung zweier benachbarter Spins. Wird die Oberfläche verrückt, so kommt die Energieänderung dadurch zustande, daß die Spins in dem von der Oberfläche durchwanderten Volumen ihre Einstellung umgedreht haben. Die Energiefluktuationen sind also proportional zu diesem Volumen und skalieren somit wie $L^D W$.

Wir equillibrieren nun die beiden Energiebeiträge. Dabei ist zu beachten, daß der Energiebeitrag der Unordnung die Wurzel aus den Fluktuationen ist. Nachdem wir nach der Rauigkeit W aufgelöst haben, können wir den Rauigkeitsexponenten für beide Arten der Unordnung ablesen

$$\begin{aligned}\zeta_{\text{RF}} &= \frac{4-D}{3} \\ \zeta_{\text{RB}} &= \frac{4-D}{4}\end{aligned}\tag{1.9}$$

Für den Random Bond Fall ist die Rauigkeit geringer als für den Random Field Fall. Der Grund hierfür ist, daß die Random Bonds nur an der Oberfläche angreifen, die Random Fields jedoch am Volumen.

1.5.2 Das Flory Argument

Eine weitere Methode, den Rauigkeitsexponenten zu bestimmen, ist das Flory Argument. Hierbei skaliert man die Längen und fordert, daß die reduzierte Hamiltonfunktion \mathcal{H}/T invariant bleibt, sowie daß der elastische und der ungeordnete Anteil gleich skalieren. Durch diese Forderungen wird der kritische Exponent ζ festgelegt. Die Längen x und z skalieren wie $\tilde{x} = x/b$ und $\tilde{z} = z/b^\zeta$. Mit der Tilde \sim werden reskalierte Größen bezeichnet. Die Unordnung skaliert wie die Wurzel des Korrelator.

$$\begin{aligned}\tilde{U}_{\text{RF}}(\tilde{x}, \tilde{z}) &= b^{(D-\zeta)/2} U_{\text{RF}}(\vec{x}, z) \\ \tilde{U}_{\text{RB}}(\tilde{x}, \tilde{z}) &= b^{(D+\zeta)/2} U_{\text{RB}}(\vec{x}, z)\end{aligned}$$

Somit ergibt sich

$$\begin{aligned}\zeta_{\text{RF}} &= \frac{4-D}{3} \\ \zeta_{\text{RB}} &= \frac{4-D}{5}.\end{aligned}\tag{1.10}$$

Bei Random Field Unordnung stimmen die Exponenten, die man aus Imry Ma und Flory Argument gewinnt, überein. Anders ist dieses bei Random Bond Unordnung. In einer Oberflächendimension haben wir die Möglichkeit, die beiden Rauigkeitsexponenten $\zeta_{\text{Flory}} = 3/5$ und $\zeta_{\text{Imry Ma}} = 3/4$ mit dem bekannten exakten Resultat $\zeta_{\text{exakt}} = 2/3$ zu vergleichen. Es stellt sich heraus, daß

$$\zeta_{\text{Flory}} < \zeta_{\text{exakt}} < \zeta_{\text{Imry Ma}}.$$

Das Imry Ma Argument überschätzt den Exponenten, während die Reskalierung der Hamiltonfunktion ihn unterschätzt. Eine Begründung hierfür zeigen exakte Grundzustandsuntersuchungen für $D = 1$ dimensionale Systeme [12]. In Abbildung (1.3) sind die optimalen Pfade (dieses sind $D = 1$ dimensionale Oberflächen) zwischen einem gemeinsamen Anfangspunkt und einem variierenden Endpunkt für Random Bond und Random Field Unordnung dargestellt. Die Grafiken zeigen einen markanten Unterschied zwischen Random Field und Random Bond Unordnung. Im Random Field Fall “teilen” sich benachbarte Pfade wesentlich früher als im Random Bond Fall. Benachbarte Pfade enthalten bei Random Bond Unordnung viele gemeinsame Segmente. Daher muß man die Annahme über den Energiegewinn durch die Unordnung, welche dem Imry Ma Argument zugrunde liegt, als eine obere Grenze betrachten. Der Rauigkeitsexponent $\zeta_{\text{Imry Ma}}$ ist damit ebenfalls eine obere Schranke.

(a)

(b)

Abbildung 1.3: Die optimalen Grundzustände von Benachbarten Grenzflächen bei Random Field (a) und Random Bond (b) Unordnung in einer Oberflächendimension: Es werden Flächen betrachtet, die einen gemeinsamen Anfangspunkt besitzen (Spitze des Dreiecks) und deren Endpunkte auf der Basis des Dreiecks liegen. Deutlich zusehen ist, daß im Random Field Fall benachbarte Flächen eine wesentlich geringere Anzahl gemeinsamer Segmente haben als im Random Bond Fall. (Abbildung aus [12])

In diesem Kapitel wird die Oberfläche mit Hilfe der funktionalen Renormierung untersucht. Sie unterscheidet sich von der “normalen” beziehungsweise, genauer gesagt, von der Parameter Renormierung dadurch, daß nicht nur die Kopplungskonstanten in der Hamiltonfunktion renormiert werden, sondern daß sich die ganze funktionale Form der Beiträge zur Hamiltonfunktion ändert. Auf der formalen Seite haben wir bei der Funktionalen Renormierung anstatt von gewöhnlichen Differentialgleichungen für die Kopplungskonstanten, wie bei der Parameter Renormierung, nun partielle Differentialgleichungen für die funktionalen Anteile der Hamiltonfunktion, wie beispielsweise des periodischen Potentials.

Die funktionale Renormierungsgruppentransformation besteht aus drei Teilschritten. Zuerst wird das Feld $z(\vec{x})$ in einen langsam und einen schnellfluktuierenden Anteil aufgespalten. Dieses entspricht der Zerlegung des Impulsraumes in eine Kugelschale mit den Impulsen $\Lambda/b < |\vec{q}| < \Lambda$ und in eine Kugel mit $|\vec{q}| < \Lambda/b$ zerlegt. Λ ist hierbei der obere Cutoff für die Impulse, der durch das zugrundeliegende Gitter zustande kommt: $\Lambda \propto 1/a_{||}$. $b > 1$ ist ein dimensionsloser Parameter. Über die Impulse in der Kugelschale wird integriert. Die dabei entstehenden Terme muß man zu geeigneten Größen in der verbleibenden Hamiltonfunktion, die nur noch von den ‘kleinen’ Impulsen abhängt, addieren. Dadurch entstehen effektive Größen. Man erhält so aus der ursprünglichen Hamiltonfunktion mit einem Cutoff von Λ eine, bei der sich der Cutoff auf Λ/b reduziert hat. Als dritten Schritt skaliert man alle Längen und Impulse so, daß der ursprüngliche Cutoff wiederhergestellt wird.

Wir betrachten eine D-dimensionale Grenzfläche in einem D+1-dimensionalen Raum. Die Fläche wird durch einen D-dimensionalen Vektor \vec{x} parametrisiert. Die Auslenkung der Fläche sei durch das einkomponentige Feld $z(\vec{x})$ gegeben. Wir beschreiben die Fläche mit der folgenden reduzierten Hamiltonfunktion:

$$\mathcal{H} = \int d^D x \frac{1}{T} \left\{ \frac{1}{2} \Gamma (\nabla z(\vec{x}))^2 - V_0 \cos \left(\frac{2\pi}{a_{\perp}} z(\vec{x}) \right) + U(z(\vec{x}), \vec{x}) \right\} \quad (1.11)$$

Reduzierte Hamiltonfunktion bedeutet, daß diese durch die Temperatur T dividiert wurde. Im weiteren Verlauf dieses Kapitels soll der Begriff Hamiltonfunktion immer die reduzierte Hamiltonfunktion meinen.

Der erste Term beschreibt die elastische Energie der Oberfläche, der zweite ist ein periodisches Potential, welches die diskrete Struktur des Gitters simuliert. Der letzte Term ist das Unordnungspotential, welches gaußverteilt ist und durch die beiden Momente

$$\begin{aligned}\overline{V(z, \vec{x})} &= 0 \\ \overline{V(z, \vec{x})V(z', \vec{x}')} &= \delta(\vec{x} - \vec{x}')R(z - z')\end{aligned}$$

charakterisiert wird. Alle höheren Momente lassen sich durch das Wick Theorem auf diese beiden zurückführen. Der Querstrich über den Größen symbolisiert hierbei die Unordnungsmittelung. Mit der Funktion $R(z)$ wird die Art der Unordnung modelliert. Für die beiden in dieser Arbeit betrachteten Unordnungsformen hat sie die Gestalt

$$R(z) \propto \begin{cases} -|z| & \text{random field} \\ \delta(z) & \text{random bond} \end{cases}.$$

Die Unordnungsmittelung behandeln wir mit Hilfe des Replikatricks. Die replizierte Hamiltonfunktion hat folgende Form

$$\mathcal{H}^n = \int d^D x \left\{ \sum_{\alpha} \frac{1}{T} \left[\frac{\Gamma}{2} (\nabla z^{\alpha}(\vec{x}))^2 - V_0 \cos \left(\frac{2\pi}{a_{\perp}} z^{\alpha}(\vec{x}) \right) \right] - \frac{1}{2T^2} \sum_{\alpha, \beta} R(z^{\alpha}(\vec{x}) - z^{\beta}(\vec{x})) \right\} \quad (1.12)$$

Die griechischen Buchstaben α und β sind die Replikaindizes, sie laufen von 1 bis n . Im Weiteren wird die Abkürzung $V(z) := V_0 \cos(2\pi z/a_{\perp})$ verwendet.

1.6 Skalierung

Zunächst wollen wir uns einen Überblick verschaffen und das Verhalten der einzelnen Anteile in der Hamiltonfunktion bei Reskalierung der auftretenden Längen betrachten. Wir ersetzen die Größen \vec{x} und z durch $\tilde{\vec{x}}$ und \tilde{z} mit

$$\vec{x} = e^l \tilde{\vec{x}}, \quad z = e^{\zeta l} \tilde{z}.$$

Die Auslenkung z der Fläche muß mit dem Rauigkeitsexponenten ζ skaliert werden, da sie wie die Rauigkeit skaliert. Hier und im folgenden deutet die Tilde \sim an, daß es sich um reskalierte Größen handelt. Diese setzen wir in die replizierte Hamiltonfunktion ein. Wir fordern nun, daß die Kopplungskonstante Γ des elastischen Terms unverändert bleibt und erhalten somit das Skalenverhalten der Temperatur.

$$\int d^D \tilde{x} e^{Dl} \frac{\Gamma}{2T} \left(\frac{d}{d\tilde{\vec{x}}} \tilde{z} e^{(\zeta-1)l} \right)^2 = \int d^D \tilde{x} \frac{\Gamma}{2\tilde{T}} \left(\frac{d}{d\tilde{\vec{x}}} \tilde{z} \right)^2$$

$$\Rightarrow \quad \tilde{T} = e^{(2-D-2\zeta)l} T$$

Mit diesem \tilde{T} bestimmen wir nun ganz analog $\tilde{R}(\tilde{z})$ und $\tilde{V}(\tilde{z})$

$$\begin{aligned} \tilde{R}(\tilde{z}) &= e^{(4-D-4\zeta)l} R(e^{\zeta l} \tilde{z}) \\ \tilde{V}(\tilde{z}) &= e^{(2-2\zeta)l} V(e^{\zeta l} \tilde{z}) \end{aligned}$$

Die hieraus folgenden Flußgleichungen lauten

$$\frac{\partial \tilde{T}}{\partial l} = (2 - D - 2\zeta) \tilde{T} \quad (1.12.a)$$

$$\frac{\partial \tilde{R}}{\partial l} = (4 - D - 4\zeta) \tilde{R} + \zeta \tilde{z} \tilde{R}' \quad (1.12.b)$$

$$\frac{\partial \tilde{V}}{\partial l} = (2 - 2\zeta) \tilde{V} + \zeta \tilde{z} \tilde{V}' \quad (1.12.c)$$

An diesen Flußgleichungen kann man bereits zwei wesentliche Dinge ablesen. Die Temperatur T fließt für $D > 2 - 2\zeta$ gegen null. In dem für uns interessanten Bereich $D \geq 2$ haben wir es also mit einem $T = 0$ Fixpunkt zu tun. Wir müssen also bei der folgenden Funktionalen Renormierung nur solche Terme mitnehmen, die auch im Grenzwert $T \rightarrow 0$ einen Beitrag liefern, die anderen fallen weg. An der Flußgleichung (1.12.b) für \tilde{R} sieht man, daß die obere kritische Dimension 4 ist. D.h. oberhalb von 4 Dimensionen ist die Unordnung irrelevant. Die Grenzfläche bleibt also wie für $D > 2$ Dimensionen im reinen Fall glatt.

1.7 Funktionale Renormierungsgruppe

Wir beginnen die Funktionale Renormierung in der üblichen Art und Weise mit der Zerlegung des Feldes $z(\vec{x})$ in den lang- und kurzwelligen Anteil.

$$\begin{aligned} z(\vec{x}) &= z^<(\vec{x}) + z^>(\vec{x}) \\ z^>(\vec{x}) &= \frac{1}{\sqrt{Vol}} \sum_q^> z_{\vec{q}} e^{i\vec{q}\vec{x}} \\ z^<(\vec{x}) &= \frac{1}{\sqrt{Vol}} \sum_q^< z_{\vec{q}} e^{i\vec{q}\vec{x}} \end{aligned}$$

$\sum_q^>$ ist dabei eine Abkürzung für die Summe über Impulse mit $\Lambda/b < |\vec{q}| < \Lambda$, $\sum_q^<$ für die über Impulse mit $|\vec{q}| < \Lambda/b$.

Der elastische Term ist diagonal in diesen beiden Teilfeldern. Das periodische Potential sowie der Unordnungsanteil müssen noch nach diesen Feldern zerlegt werden. Beide Terme werden nach den kurzwelligen Feldern bis zur zweiten Ordnung entwickelt.

$$V(z) = V(z^< + z^>) = V(z^<) + V'(z^<) z^> + \frac{1}{2} V''(z^<) z^>^2 + O(z^>^3)$$

Der Strich ' symbolisiert die Ableitungen nach z . Bei der Funktion R ist noch darauf zu achten, daß sie nicht diagonal in den Replikaindizes ist. Zur Vereinfachung führen wir die Abkürzung $z^{\alpha\beta} := z^\alpha - z^\beta$ ein.

$$\begin{aligned} R(z^{\alpha\beta}) &= R(z^{\alpha\beta<} + z^{\alpha\beta>}) \\ &= R(z^{\alpha\beta<}) + R'(z^{\alpha\beta<}) z^{\alpha\beta>} + \frac{1}{2} R''(z^{\alpha\beta<}) z^{\alpha\beta>^2} + O(z^{\alpha\beta>^3}) \end{aligned}$$

Bei der Summation über die Replikaindizes kann man die Symmetrie der Funktion R

$$R(z) = R(-z) \quad \Rightarrow \quad R'(z) = -R'(-z) \quad \Rightarrow \quad R''(z) = R''(-z)$$

sowie $z^{\alpha\beta} = -z^{\beta\alpha}$ ausnutzen. Man erhält somit

$$\begin{aligned} \sum_{\alpha,\beta} R'(z^{\alpha\beta<}) (z^{\alpha>} - z^{\beta>}) &= \sum_{\alpha,\beta} 2 \cdot R'(z^{\alpha\beta<}) z^{\alpha>} \\ \sum_{\alpha,\beta} R''(z^{\alpha\beta<}) (z^{\alpha>} - z^{\beta>})^2 &= -2 \sum_{\alpha,\beta} \underbrace{\left(R''(z^{\alpha\beta<}) - \sum_{\gamma} R''(z^{\alpha\gamma<}) \delta^{\alpha\beta} \right)}_{=: Q^{\alpha\beta} = Q^{\beta\alpha}} z^{\alpha>} z^{\beta>}. \end{aligned}$$

Wir führen folgend Fouriertransformationen ein:

$$\begin{aligned} V'^\alpha(\vec{q}) &:= \int d^D x \frac{1}{\sqrt{Vol}} e^{i\vec{q}\vec{x}} V'(z^{\alpha<}(\vec{x})) \\ V''^\alpha(\vec{q}) &:= \int d^D x \frac{1}{Vol} e^{i\vec{q}\vec{x}} V''(z^{\alpha<}(\vec{x})) \\ R'^{\alpha\beta}(\vec{q}) &:= \int d^D x \frac{1}{\sqrt{Vol}} e^{i\vec{q}\vec{x}} R'(z^{\alpha\beta<}(x)) \\ Q^{\alpha\beta}(\vec{q}) &:= \int d^D x \frac{1}{Vol} e^{i\vec{q}\vec{x}} Q^{\alpha\beta} \end{aligned}$$

und erhalten die Zerlegung der Hamiltonfunktion

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}(z^{\alpha\beta<}) + \mathcal{H}_0(z^{\alpha>}) + \mathcal{H}_1(z^{\alpha\beta<}, z^{\alpha\beta>}) + O(z^{>3})$$

mit

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_0(z^{\alpha>}) &= \sum_{\alpha} \sum_{\vec{q}}^> \frac{\Gamma}{2T} q^2 z_{\vec{q}}^{\alpha} z_{-\vec{q}}^{\alpha} \\ \mathcal{H}_1(z^{\alpha\beta<}, z^{\alpha\beta>}) &= \\ &\quad -\frac{1}{T} \sum_{\alpha} \left(\sum_{\vec{q}}^> V'^{\alpha}(\vec{q}) z_{\vec{q}}^{\alpha} \sum_{\vec{q}, \vec{q}'}^> + \frac{1}{2} V''^{\alpha}(\vec{q} + \vec{q}') z_{\vec{q}}^{\alpha} z_{\vec{q}'}^{\alpha} \right) \\ &\quad -\frac{1}{2T^2} \sum_{\alpha, \beta} \left(\sum_{\vec{q}}^> R'^{\alpha\beta}(\vec{q}) z_{\vec{q}}^{\alpha} - \sum_{\vec{q}, \vec{q}'}^> Q^{\alpha\beta}(\vec{q} + \vec{q}') z_{\vec{q}}^{\alpha} z_{\vec{q}'}^{\beta} \right). \end{aligned}$$

$\mathcal{H}(z^{\alpha\beta<})$ hat dieselbe funktionale Gestalt wie die ursprüngliche Hamiltonfunktion. Der einzige Unterschied zwischen beiden ist, daß diese nur noch von den kleinen Impulsen abhängt. $\mathcal{H}_0(z^{\alpha>})$ ist eine quadratische Hamiltonfunktion, die nur große Impulse enthält und zudem diagonal in den Replikaindizes ist. $\mathcal{H}_1(z^{\alpha\beta<}, z^{\alpha\beta>})$ hängt von allen erlaubten Impulsen ab. Somit werden hierdurch die Anteile mit kleinen und großen Impulsen gekoppelt. Durch die Renormierungsgruppentransformation entstehen aus diesem Teil der Hamiltonfunktion die Korrekturen zu $\mathcal{H}(z^{\alpha\beta<})$.

Hiermit können wir nun die kurzwelligen Freiheitsgrade ausintegrieren, das heißt wir bilden die Zustandssumme, wobei wir nur über die Feldanteile mit den großen Impulsen integrieren. Das Resultat interpretieren wir als $\exp(-\mathcal{H}_{\text{renormiert}}(z^{\alpha\beta<}))$.

$$\begin{aligned} \prod_{\vec{q}}^> \int_{-\infty}^{\infty} dz_{\vec{q}} e^{-\mathcal{H}} &= e^{-\mathcal{H}(z^{<})} \left\langle e^{-\mathcal{H}_1(z^{<}, z^{>})} \right\rangle_{\mathcal{H}_0(z^{>})} Z_0^{>} \\ &= e^{-\mathcal{H}(z^{<})} Z_0^{>} \exp \left\langle e^{-\mathcal{H}_1(z^{<}, z^{>})} - 1 \right\rangle_{\mathcal{H}_0(z^{>}), C} \\ &= e^{-\mathcal{H}(z^{<})} Z_0^{>} e^{-\delta\mathcal{H}} \end{aligned}$$

Um die Kumulanten zu berechnen, benötigt man die Erwartungswerte der verschiedenen Potenzen von $z_{\vec{q}}$. Da die Hamiltonfunktion \mathcal{H}_0 quadratisch und diagonal in den Impulsen \vec{q} ist, kann man das *Wick Theorem* anwenden. Die Erwartungswerte mit einer ungeraden Anzahl von z verschwinden. Die mit einer geraden werden auf den quadratischen Erwartungswert

zurückgeführt, wobei

$$\left\langle z_{\vec{q}}^{\alpha} z_{\vec{q}'}^{\beta} \right\rangle_{\mathcal{H}_0(z>)} = \delta^{\alpha,\beta} \delta_{\vec{q},-\vec{q}'} \frac{T}{\Gamma q^2}$$

ist.

In erster Ordnung erhält man:

$$\begin{aligned} \delta \mathcal{H}^{(1)} &= -\frac{1}{2T} \sum_{\vec{q}, \vec{q}'}^> \sum_{\alpha} V''^{\alpha}(\vec{q} + \vec{q}') \delta_{\vec{q},-\vec{q}'} \frac{T}{\Gamma q^2} \\ &\quad + \frac{1}{2T^2} \sum_{\vec{q}, \vec{q}'}^> \sum_{\alpha, \beta} Q^{\alpha\beta}(\vec{q} + \vec{q}') \delta^{\alpha,\beta} \delta_{\vec{q},-\vec{q}'} \frac{T}{\Gamma q^2} \\ &= \sum_{\vec{q}}^> \sum_{\alpha} \left(\frac{1}{2} V''^{\alpha}(0) + \frac{1}{2T} Q^{\alpha\alpha}(0) \right) \frac{1}{\Gamma q^2} \end{aligned}$$

Die hier auftretende Summe über die Impulse q nähern wir durch ein Integral:

$$\begin{aligned} \sum_{\vec{q}}^> \frac{1}{q^2} &\approx Vol \int^> \frac{d^D q}{(2\pi)^D} \frac{1}{q^2} = Vol K_D \int_{\Lambda/b}^{\Lambda} dq q^{D-3} \\ &= Vol K_D \frac{1}{D-2} \Lambda^{D-2} (1 - b^{2-D}) \end{aligned}$$

K_D ist dabei die Oberfläche der D-dimensionalen Einheitskugel dividiert durch $(2\pi)^D$. Dieser Term zeigt für $D > 2$ und $b \rightarrow \infty$ keine Divergenz. Somit können die Beiträge der ersten Ordnung vernachlässigt werden.

Als nächstes wird die zweite Ordnung betrachtet:

$$\begin{aligned} \delta \mathcal{H}^{(2)} &= \frac{1}{2} \left\langle \left[-\frac{1}{T} \sum_{\alpha} \left(\sum_{\vec{q}}^> V'^{\alpha}(\vec{q}) z_{\vec{q}}^{\alpha} \sum_{\vec{q}'}^> + \frac{1}{2} V''^{\alpha}(\vec{q} + \vec{q}') z_{\vec{q}}^{\alpha} z_{\vec{q}'}^{\alpha} \right) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \frac{1}{2T^2} \sum_{\alpha, \beta} \left(\sum_{\vec{q}}^> \tilde{R}'^{\alpha\beta}(\vec{q}) z_{\vec{q}}^{\alpha} - \sum_{\vec{q}, \vec{q}'}^> Q^{\alpha\beta}(\vec{q} + \vec{q}') z_{\vec{q}}^{\alpha} z_{\vec{q}'}^{\beta} \right) \right] \right\rangle_{\mathcal{H}_0(z>), C}^2 \end{aligned}$$

Durch Ausmultiplizieren des Quadrats $[\dots]^2$ entstehen 10 verschiedene Summanden, die als Kandidaten für Korrekturen in Frage kommen. Vier sind von der Ordnung z^3 und fallen somit bei der Mittelung weg. Drei sind quadratisch in z :

$$\begin{aligned} \frac{1}{2T^2} \sum_{\alpha\alpha'} \sum_{\vec{q}\vec{q}'}^> V'^{\alpha}(\vec{q}) V'^{\alpha'}(\vec{q}') \delta^{\alpha,\alpha'} \delta_{\vec{q},-\vec{q}'} \frac{T}{\Gamma q^2} \\ = \frac{1}{2T} \sum_{\alpha} \sum_{\vec{q}}^> V'^{\alpha}(\vec{q}) V'^{\alpha}(-\vec{q}) \frac{1}{\Gamma q^2} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{8T^4} \sum_{\substack{\alpha, \beta \\ \alpha' \beta'}} \sum_{\vec{q}, \vec{q}'}^> R'^{\alpha\beta}(\vec{q}) \tilde{R}'^{\alpha'\beta'}(\vec{q}') \delta^{\alpha, \alpha'} \delta_{\vec{q}, \vec{q}'} \frac{T}{\Gamma q^2} \\
&= \frac{1}{8T^3} \sum_{\substack{\alpha, \beta \\ \beta'}} \sum_{\vec{q}}^> \tilde{R}'^{\alpha\beta}(\vec{q}) R'^{\alpha\beta}(-\vec{q}) \delta_{\vec{q}, -\vec{q}'} \frac{1}{\Gamma q^2} \\
& \frac{1}{2T^3} \sum_{\substack{\alpha, \beta \\ \alpha'}} \sum_{\vec{q}, \vec{q}'}^> R'^{\alpha\beta}(\vec{q}) V'^{\alpha'}(\vec{q}') \delta^{\alpha, \alpha'} \delta_{\vec{q}, -\vec{q}'} \frac{T}{\Gamma q^2} \\
&= \frac{1}{2T^2} \sum_{\alpha, \beta} \sum_{\vec{q}}^> R'^{\alpha\beta}(\vec{q}) V'^{\alpha}(-\vec{q}) \frac{T}{\Gamma q^2}
\end{aligned}$$

Bei diesen drei Beiträgen taucht wieder $\sum_{\vec{q}}^> 1/q^2$ auf, so daß sie keine Divergenz für $b \rightarrow \infty$ zeigen. Sie werden also vernachlässigt.

Der Term, der quadratisch in V'' ist, ist von der Ordnung T^0 . Wie wir bereits weiter oben gesehen haben, handelt es sich bei diesem Problem um einen $T = 0$ Fixpunkt. Die Terme, die einen Beitrag liefern, müssen also von derselben Ordnung in T sein, wie die Größen in der ursprünglichen replizierten Hamiltonfunktion. Der Term des periodischen Potentials ist von der Ordnung T^{-1} . Somit wird der in V'' quadratische Term vernachlässigt.

Der quadratische Term in Q sieht folgendermaßen aus:

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{8T^4} \sum_{\substack{\alpha, \beta \\ \alpha' \beta'}} \sum_{\substack{\vec{q}, \vec{q}' \\ \vec{k}, \vec{k}'}}^> Q^{\alpha\beta}(\vec{q} + \vec{q}') Q^{\alpha'\beta'}(\vec{k} + \vec{k}') \left\langle \left(z_{\vec{q}}^{\alpha} z_{\vec{q}'}^{\beta} \right) \cdot \left(z_{\vec{k}}^{\alpha'} z_{\vec{k}'}^{\beta'} \right) \right\rangle_{\mathcal{H}_0(z>), C} \\
&= \frac{1}{4\Gamma^2 T^2} \sum_{\alpha, \beta} \sum_{\vec{q}, \vec{q}'}^> Q^{\alpha\beta}(\vec{q} + \vec{q}') Q^{\alpha\beta}(-\vec{q} - \vec{q}') \frac{1}{q^2} \frac{1}{q'^2} \quad (1.14)
\end{aligned}$$

Als erstes ersetzen wir die Summe über \vec{q} und \vec{q}' durch entsprechende Integrale und führen $\vec{k} = \vec{q} + \vec{q}'$ ein:

$$\begin{aligned}
& \sum_{\vec{q}, \vec{q}'}^> Q^{\alpha\beta}(\vec{q} + \vec{q}') Q^{\alpha\beta}(-\vec{q} - \vec{q}') \frac{1}{q^2} \frac{1}{q'^2} \\
&= \text{Vol}^2 \int^o \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \int^> \frac{d^D q}{(2\pi)^D} Q^{\alpha\beta}(\vec{k}) \tilde{Q}^{\alpha\beta}(-\vec{k}) \frac{1}{q^2} \frac{1}{(\vec{k} + \vec{q})^2}
\end{aligned}$$

Der Krinkel o am Integral zeigt an, daß k so gewählt sein soll, daß \vec{q} und \vec{q}' in der Kugelschale mit $\Lambda/b < |\vec{q}| < \Lambda$ liegen. Wir nehmen an, daß die Q 's nur einen Beitrag für kleine k liefern. Dann nähern wir $1/(\vec{k} + \vec{q})^2 \approx 1/q^2$. Somit vereinfacht sich das Integral

zu

$$\begin{aligned}
& \text{Vol}^2 \int^o \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \int^> \frac{d^D q}{(2\pi)^D} \tilde{Q}^{\alpha\beta}(\vec{k}) Q^{\alpha\beta}(-\vec{k}) \frac{1}{q^4} \\
&= \text{Vol}^2 \int^o \frac{d^D k}{(2\pi)^D} Q^{\alpha\beta}(\vec{k}) Q^{\alpha\beta}(-\vec{k}) \frac{K_D}{\epsilon} \Lambda^{-\epsilon} (b^\epsilon - 1) \\
&= \int d^D x Q^{\alpha\beta} Q^{\alpha\beta} \frac{K_D}{\epsilon} \Lambda^{-\epsilon} (b^\epsilon - 1).
\end{aligned}$$

Dieser Term zeigt eine Divergenz für $D < 4$ und $b \rightarrow \infty$. Wir setzen nun die $Q^{\alpha\beta}$ ein:

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{4\Gamma^2 T^2} \int d^D x \sum_{\alpha, \beta} \left\{ R''^2 \left(z^{\alpha\beta <} \right) - 2R''(0) R'' \left(z^{\alpha\beta <} \right) \right. \\
& \quad \left. + R'' \left(z^{\alpha\beta <} \right) \sum_{\gamma} R'' \left(z^{\alpha\gamma <} \right) \frac{K_D}{\epsilon} \Lambda^{-\epsilon} (b^\epsilon - 1) \right\}
\end{aligned}$$

Hier haben wir drei verschiedene Beiträge. Alle drei sind von der Ordnung T^{-2} . Die ersten beiden enthalten zwei Replikaindizes, somit liefern sie einen Beitrag zur Renormierung von R . Der letzte Term hängt von drei Replikaindizes ab. Er würde also eine ‘Drei-Replika-Kopplung’, die in der ursprünglichen Hamiltonfunktion nicht vorhanden ist, renormieren. Es bleibt die Frage, ob dieser Term eine drei Replika Kopplung generieren kann. Wir betrachten dazu, wie eine Kopplung zwischen drei Replikas in der replizierten Hamiltonfunktion zustande kommen könnte. Die Mischterme entstehen durch die Unordnungsmittelung. Um einen Term mit drei Replikaindizes zu generieren, müßte die Unordnungsverteilung noch nichtgaußsche Anteile enthalten. Außer dem quadratischen müßte es noch andere Momente der Unordnungsverteilung geben, die sich nicht durch das quadratisch Moment ausdrücken lassen. Eine hieraus entstehende Kopplung von drei Replikas wäre aber von der Ordnung T^{-3} [6]. Somit ist dieser Term für einen $T = 0$ Fixpunkt irrelevant, da er von der Ordnung T^{-2} ist. Folglich vernachlässigen wir ihn.

Es bleibt noch ein Mischterm zwischen dem ungeordneten und periodischen Potential zu betrachten.

$$\begin{aligned}
& -\frac{1}{2T^3} \sum_{\substack{\alpha, \beta \\ \alpha'}} \sum_{\substack{\vec{q}, \vec{q}' \\ \vec{k}, \vec{k}'}}^> Q^{\alpha\beta}(\vec{q} + \vec{q}') V''^{\alpha'}(\vec{k} + \vec{k}') \delta^{\alpha, \alpha'} \delta^{\beta, \alpha'} \delta_{\vec{q}, -\vec{k}} \delta_{\vec{q}', -\vec{k}'} \frac{T}{\Gamma q^2} \frac{T}{\Gamma q'^2} \\
&= -\frac{1}{2\Gamma^2 T} \sum_{\alpha} \sum_{\vec{q}, \vec{q}'}^> Q^{\alpha\alpha}(\vec{q} + \vec{q}') V''^{\alpha}(-\vec{q} - \vec{q}') \frac{1}{q^2} q'^2 \\
&= -\frac{\text{Vol}^2}{2\Gamma^2 T} \sum_{\alpha} \int^o \frac{d^D k}{(2\pi)^D} Q^{\alpha\alpha}(\vec{k}) V''^{\alpha}(-\vec{k}) \frac{K_D}{\epsilon} \Lambda^{-\epsilon} (b^\epsilon - 1)
\end{aligned}$$

Hierbei wurde wieder $\vec{k} = \vec{q} + \vec{q}'$ eingeführt und die Annahme gemacht, daß das Integral

nur Beiträge für kleine \vec{k} liefert. In der Ortsdarstellung haben wir nun

$$-\frac{1}{2\Gamma^2 T} \sum_{\alpha} \int d^D x \left[R''(0) - \sum_{\beta} R''(z^{\alpha\beta<}) \right] V''(z^{\alpha<}) \frac{K_D}{\epsilon} \Lambda^{-\epsilon} (b^{\epsilon} - 1).$$

Der erste Summand hängt von einem Replikaindex ab. Er ist von der Ordnung T^{-1} . Somit handelt es sich um eine Korrektur zu V . Der zweite enthält eine Summe über zwei Replikaindizes, er könnte also einen Beitrag zu R liefern. Dazu hat er allerdings die falsche Ordnung in T . Er fällt also weg.

Damit haben wir alle Terme in dieser Ordnung betrachtet. Wir erhalten insgesamt die effektiven Größen

$$R_{eff} = R(y) + \frac{1}{2} \frac{K_D}{\Gamma^2} \frac{1}{\epsilon} \Lambda^{-\epsilon} (b^{\epsilon} - 1) \left[R''^2(z) - 2R''(z)R''(0) \right] \quad (1.15)$$

$$V_{eff} = V(z) - \frac{1}{2} \frac{K_D}{\Gamma^2} \frac{1}{\epsilon} \Lambda^{-\epsilon} (b^{\epsilon} - 1) V''(z) R''(0). \quad (1.16)$$

Für die Temperatur T ergeben sich in dieser Ordnung der Entwicklung keine Korrekturen. Die replizierte Hamiltonfunktion hat nun wieder die Gestalt von (1.12), wobei das periodische Potential und der Unordnungskorrelator durch die effektiven Größen ersetzt worden sind. Der obere Cutoff hat sich von Λ auf Λ/b reduziert.

Wir reskalieren die auftretenden Längen wie in Abschnitt 1.6 und stellen somit den ursprünglichen Cutoff wieder her. Mit einem infinitesimal gewählten $l = \ln(b)$ erhalten wir folgendes Flußgleichungssystem:

$$\frac{\partial \tilde{T}}{\partial l} = (2 - D - 2\zeta) \tilde{T} \quad (1.16.a)$$

$$\frac{\partial \tilde{R}}{\partial l} = (\epsilon - 4\zeta) \tilde{R} + \zeta \tilde{z} \tilde{R}' + \frac{K_D \Lambda^{-\epsilon}}{2\Gamma^2} \left[\tilde{R}''^2(\tilde{z}) - 2\tilde{R}''(\tilde{z}) \tilde{R}''(0) \right] \quad (1.16.b)$$

$$\frac{\partial \tilde{V}}{\partial l} = (2 - 2\zeta) \tilde{V} + \zeta \tilde{z} \tilde{V}' - \frac{1}{2} \frac{K_D}{\Gamma^2} \Lambda^{-\epsilon} \tilde{V}''(\tilde{z}) \tilde{R}''(0) \quad (1.16.c)$$

Die ersten beiden Gleichungen entsprechen genau denen von D.S. Fisher [7]. Neu hinzugekommen ist die dritte Gleichung für das periodische Potential. Eine erweiterte Form dieser Gleichung taucht bei J. Kierfeld beim Problem gekoppelter Schichtsupraleiter auf [13]. Wir definieren nun noch

$$\tilde{D}(\tilde{z}) := \frac{K_D \Lambda^{-\epsilon}}{\Gamma^2} \tilde{R}(\tilde{z}),$$

um uns von den physikalisch unbedeutenden Konstanten in den Flußgleichungen zu befreien und erhalten

$$\frac{\partial \tilde{T}}{\partial l} = (2 - D - 2\zeta)\tilde{T} \quad (1.17.a)$$

$$\frac{\partial \tilde{D}}{\partial l} = (\epsilon - 4\zeta)\tilde{D} + \zeta \tilde{z} \tilde{D}' + \frac{1}{2} \left[\tilde{D}''^2(\tilde{z}) - 2\tilde{D}''(\tilde{z})\tilde{D}''(0) \right] \quad (1.17.b)$$

$$\frac{\partial \tilde{V}}{\partial l} = (2 - 2\zeta)\tilde{V} + \zeta \tilde{z} \tilde{V}' - \frac{1}{2} \tilde{V}''(\tilde{z})\tilde{D}''(0). \quad (1.17.c)$$

1.8 Fixpunkte der Flußgleichungen

Um die verschiedenen Phasen zu bestimmen, ist es nötig, die Fixpunkte der Flußgleichungen zu bestimmen. Besonders einfach ist dieses für die Temperatur. $T = 0$ ist hier ein Fixpunkt. Da die zugehörige Flußgleichung eine lineare, gewöhnliche Differentialgleichung erster Ordnung ist, kann man sie auch vollständig lösen

$$\tilde{T}(l) = T(l=0)e^{(2-D-2\zeta)l}.$$

Somit wird die Temperatur für große l und Dimensionen $D > 2-2\zeta$, was großen Längenskalen entspricht, gegen null getrieben. $T = 0$ entspricht einem stabilen Fixpunkt. Er beschreibt somit eine Phase und keinen Phasenübergang. Dieses Resultat haben wir schon bei der Herleitung der Flußgleichung für das periodische Potential und den Unordnungskorrelator verwendet.

Schwieriger ist es bei den anderen beiden Flußgleichungen, da es sich hier um partielle Differentialgleichungen handelt. Weiterhin müssen wir noch anstelle eines Anfangswertes, wie bei der Temperatur, Randbedingungen, die durch die ursprünglichen, unrenormierten Größen gegeben sind, berücksichtigen. Für das periodische Potential V ist die Randbedingung, daß die Funktion periodisch ist. Die Randbedingung des Unordnungskorrelator ist bei den beiden Unordnungsarten unterschiedlich. Im Random Field Fall ist die Randbedingung die Asymptotik des Korrelators für große z , $R(z) \propto -|z|$. Im Random Bond Fall hingegen die Tatsache, daß die Korrelationen kurzreichweitig sind.

Wir betrachten zunächst die Flußgleichung für den Unordnungskorrelator. Dieses ist genau dieselbe Flußgleichung, die D.S. Fisher in seiner Arbeit zu einem ähnlichen Problem, nämlich dem ohne Periodischen Potential, gefunden hat [7]. Wir erhalten also für die beiden Unordnungsarten dieselben Fixpunkte wie er.

Zunächst betrachten wir den Random Field Fall. Setzen wir hier das asymptotische Verhalten des Unordnungskorrelators ein, so ist damit der Rauigkeitsexponent ζ bereits festgelegt.

$$\zeta = \frac{\epsilon}{3} \quad (1.19)$$

Mit diesem ζ haben wir nun die Gleichung

$$-\frac{\epsilon}{3}\tilde{D}(\tilde{z}) + \frac{\epsilon}{3}\tilde{z}\tilde{D}'(\tilde{z}) + \frac{1}{2}\left[\tilde{D}''^2(\tilde{z}) - 2\tilde{D}''(\tilde{z})\tilde{D}''(0)\right] = 0$$

zu lösen. Leiten wir diese Gleichung nun einmal nach \tilde{z} ab und dividieren sie danach durch $\tilde{D}''(\tilde{z})$, so erhalten wir eine elementar integrable Gleichung. Diese ausgeführt ergibt nun eine implizite Gleichung für die zweite Ableitung der Fixpunktfunktion $\tilde{D}^{*''}(\tilde{z})$

$$\tilde{\Delta}^* \ln\left(-\frac{\tilde{D}^{*''}(\tilde{z})}{\tilde{\Delta}^*}\right) + \tilde{\Delta}^* + \tilde{D}^{*''}(\tilde{z}) = -\frac{\epsilon}{6}\tilde{z}^2, \quad (1.20)$$

wobei $\tilde{\Delta}^* := -\tilde{D}^{*''}(0)$ gesetzt wurde. $\tilde{\Delta}^*$ ist durch die obige Gleichung noch nicht bestimmt und parametrisiert somit eine ganze Familie von Fixpunktfunktionen, die sich durch einen unterschiedlichen Längenmaßstab in z -Richtung unterscheiden. Eine natürliche Wahl für $\tilde{\Delta}^*$ ist

$$\tilde{\Delta}^* = \epsilon. \quad (1.21)$$

Im Falle von Random Bond Unordnung kann man die Fixpunktfunktion nur numerisch bestimmen. Für große \tilde{z} verhält sich hier der Korrelator am Fixpunkt wie

$$\tilde{D}^*(\tilde{z}) \propto \epsilon \tilde{z}^{-5+\frac{\epsilon}{\zeta}} e^{-\frac{\tilde{z}^2}{2\epsilon}}. \quad (1.22)$$

Die numerische Berechnung liefert den Rauigkeitsexponenten

$$\zeta \approx 0.2083\epsilon \quad (1.23)$$

Als letztes müssen wir nun die Fixpunktfunktion für das periodische Potential finden. Die Unordnung geht hier durch den Faktor $\tilde{D}''(0)$ ein. Setzen wir hier $\tilde{V} \equiv 0$, so stellen wir fest, daß dieses ein Fixpunkt der Flußgleichung ist. Wir müssen jetzt noch die Stabilitätseigenschaften dieses Fixpunktes untersuchen. Die Reskalierung in z -Richtung bringt den schwierigen Term $\zeta z \tilde{V}'(z)$ in die Flußgleichung hinein. Um diesen zu vermeiden, betrachten wir das zwar renormierte aber *nicht* reskalierte effektive Potential.

$$V_{eff}(z) = V(z) - \frac{1}{2} \frac{1}{\epsilon} V''(z) D''(0) (b^\epsilon - 1)$$

Mit $q_0 := \Lambda/b$ erhalten wir somit die Flußgleichung

$$\frac{\partial V}{\partial q_0} = \frac{1}{2} \frac{1}{\epsilon} V''(z) D''(0) q_0^{-\epsilon-1}$$

Da es sich hierbei um Größen handelt, die nicht reskaliert wurden, der gefundene Fixpunkt \tilde{D} aber eine reskalierte Größe ist, muß die Skalierung noch rückgängig gemacht werden.

$$\begin{aligned} \tilde{D}(\tilde{z}) &= b^{\epsilon-4\zeta} D(b^\zeta \tilde{z}) \\ \Rightarrow \tilde{D}''(\tilde{z}) &= b^{\epsilon-2\zeta} D''(b^\zeta \tilde{z}) \\ \Rightarrow D''(0) &= b^{-\epsilon+2\zeta} \tilde{D}''(0) = -b^{-\epsilon+2\zeta} \epsilon \end{aligned}$$

Weiterhin sehen wir, daß sich der Cosinus des periodischen Potentials durch die zweite Ableitung von V nach z reproduziert. Wir nehmen nun an, daß durch die Renormierung nur der Vorfaktor V_0 des periodischen Potentials beeinflußt wird. Somit erhalten wir hier eine Flußgleichung für eben diesen Vorfaktor V_0 :

$$\frac{dV_0}{dq_0} = \frac{1}{2} \Lambda^{2\zeta} \left(\frac{2\pi}{a_\perp} \right)^2 \epsilon q_0^{-2\zeta-1} V_0$$

Wir erhalten also eine lineare Differentialgleichung der Ordnung 1. Diese können wir nun durch Trennung der Variablen lösen. Wie integrieren die resultierende Gleichung $q_0 = 1/L$ bis $q_0 = \Lambda$ und erhalten

$$V_0(L) = V_0(a_\parallel) \cdot \exp \left(- \left(\frac{2\pi}{a_\perp} \right)^2 \frac{\epsilon}{4\zeta} ((\Lambda L)^{2\zeta} - 1) \right). \quad (1.24)$$

Wir sehen, daß das periodische Potential auf großen Längenskalen immer irrelevant wird. Das bedeutet, daß unsere Grenzfläche immer rauh ist. Die hier vorgestellte Rechnung liefert also keinen Phasenübergang zwischen einer glatten und einer rauhen Phase. Die Art der vorhandenen Unordnung geht hier nur über den Rauigkeitsexponenten ζ ein. Somit verschwindet das periodische Potential für den Random Field Fall schneller als für den Random Bond Fall. Dieses verträgt sich mit der Vorstellung, daß die Random Field Unordnung eine stärkere Unordnung als die Random Bond Unordnung ist. Bei der Random Bond Unordnung spielen nur die Defekte in einer relativ kleinen Umgebung der Grenzfläche eine Rolle. Die zusätzlichen Energiebeiträge der Zufallsfelder erhält man, indem man die Fläche von $z = \pm\infty$ in das System hineinschiebt. Es handelt sich hierbei also um eine Art Volumeneffekt. Dies spiegelt sich auch in der Korrelationsfunktion wieder, für Random Fields ist sie langreichweitig, für Random Bonds hingegen lokal.

Kapitel 2

Variationsrechnung

In diesem Kapitel wollen wir den Einfluß des periodischen Potentials mit Hilfe der Variationsrechnung untersuchen. Bei diesem Verfahren wird die ursprüngliche Hamiltonfunktion durch eine einfachere ersetzt. Diese vereinfachte Hamiltonfunktion enthält noch Parameter, die zu bestimmen sind. Dieses geschieht durch die Minimierung eines geeigneten *Variations-Funktional*s (Anhang 1.1)

$$\mathcal{F}^{\text{var}} := F_0 + \langle \mathcal{H} - \mathcal{H}_0 \rangle_{\mathcal{H}_0}.$$

Hierbei ist \mathcal{H} die ursprüngliche und \mathcal{H}_0 die Variations-Hamiltonfunktion. F_0 ist die Freie Energie der Variations-Hamiltonfunktion:

$$F_0 = -T \ln \text{Tr } e^{-\frac{\mathcal{H}_0}{T}}$$

Auch hier rechnen wir wieder in $\epsilon = 4 - D$ Dimensionen. Wir ersetzen das periodische Potential durch ein quadratisches, im folgenden Masseterm genannt. Der zu variierende Parameter ist die Kopplungskonstante dieses Terms, die Masse m . Wir haben also

$$\mathcal{H} = \int d^D x \left\{ \frac{\Gamma}{2} (\nabla z(\vec{x}))^2 - V_0 \cos \left(\frac{2\pi}{a_{\perp}} z(\vec{x}) \right) + U(z(\vec{x}), \vec{x}) \right\} \quad (2.1)$$

$$\mathcal{H}_0 = \int d^D x \left\{ \frac{\Gamma}{2} (\nabla z(\vec{x}))^2 + \frac{1}{2} m^2 z^2(\vec{x}) + U(z(\vec{x}), \vec{x}) \right\} \quad (2.2)$$

Hierbei handelt es sich wieder um replizierte Hamiltonfunktionen. Den Index n haben wir hier und im folgenden weggelassen.

Wir wollen nun das Variations-Funktional minimieren. Dazu berechnen wir

$$\frac{\partial \mathcal{F}^{\text{var}}}{\partial m} = \frac{\partial}{\partial m} \left\{ -T \ln \mathcal{Z}_0 + \frac{1}{\mathcal{Z}_0} \text{Tr} \left[(\mathcal{H} - \mathcal{H}_0) e^{-\frac{\mathcal{H}_0}{T}} \right] \right\},$$

wobei $\mathcal{Z}_0 = \text{Tr} \exp(-\mathcal{H}_0/T)$ die Zustandssumme bezüglich der Hamiltonfunktion \mathcal{H}_0 ist. Diesen Ausdruck gleich null. Wir benutzen die Tatsache, daß nur \mathcal{H}_0 und \mathcal{Z}_0 von m abhängen:

$$0 = \left\{ -T \frac{1}{\mathcal{Z}_0} - \frac{1}{\mathcal{Z}_0^2} \text{Tr} \left[(\mathcal{H} - \mathcal{H}_0) e^{-\frac{\mathcal{H}_0}{T}} \right] \right\} \frac{\partial \mathcal{Z}_0}{\partial m} + \frac{1}{\mathcal{Z}_0} \text{Tr} \left[-\frac{\partial \mathcal{H}_0}{\partial m} \left(1 + \frac{1}{T} (\mathcal{H} - \mathcal{H}_0) \right) e^{-\frac{\mathcal{H}_0}{T}} \right]$$

Wir berechnen weiter

$$\frac{\partial \mathcal{Z}_0}{\partial m} = \frac{\partial}{\partial m} \text{Tr} e^{-\frac{\mathcal{H}_0}{T}} = \text{Tr} \left(-\frac{1}{T} \frac{\partial \mathcal{H}_0}{\partial m} e^{-\frac{\mathcal{H}_0}{T}} \right) = -\frac{\mathcal{Z}_0}{T} \left\langle \frac{\partial \mathcal{H}_0}{\partial m} \right\rangle_{\mathcal{H}_0}$$

und erhalten somit

$$\begin{aligned} 0 &= \left\langle \frac{\partial \mathcal{H}_0}{\partial m} \right\rangle_{\mathcal{H}_0} + \frac{1}{T} \langle \mathcal{H} - \mathcal{H}_0 \rangle_{\mathcal{H}_0} \left\langle \frac{\partial \mathcal{H}_0}{\partial m} \right\rangle_{\mathcal{H}_0} \\ &\quad - \left\langle \frac{\partial \mathcal{H}_0}{\partial m} \right\rangle_{\mathcal{H}_0} - \frac{1}{T} \left\langle (\mathcal{H} - \mathcal{H}_0) \frac{\partial \mathcal{H}_0}{\partial m} \right\rangle_{\mathcal{H}_0} \\ &= \frac{1}{T} \langle \mathcal{H} - \mathcal{H}_0 \rangle_{\mathcal{H}_0} \left\langle \frac{\partial \mathcal{H}_0}{\partial m} \right\rangle_{\mathcal{H}_0} - \frac{1}{T} \left\langle (\mathcal{H} - \mathcal{H}_0) \frac{\partial \mathcal{H}_0}{\partial m} \right\rangle_{\mathcal{H}_0}. \end{aligned}$$

Diese können wir noch als Kumulanten-Erwartungswert zusammenfassen und erhalten somit nach der Multiplikation mit T die Selbstkonsistenzgleichung

$$0 = \left\langle (\mathcal{H} - \mathcal{H}_0) \cdot \frac{\partial \mathcal{H}_0}{\partial m} \right\rangle_{\mathcal{H}_0, C}. \quad (2.3)$$

Wir müssen nun diese Kumulante berechnen. Wir nehmen dazu an, daß das Feld $z(\vec{x})$ durch die Variations-Hamiltonfunktion gaußverteilt ist. Dieses gilt nach D.S. Fisher [7] zumindestens für $T = 0$. Durch diese Annahme können wir das Wick-Theorem verwenden (Anhang 1.2).

$$\begin{aligned} 0 &= \left\langle \left[\int d^D x -V_0 \cos \left(\frac{2\pi}{a_\perp} z(\vec{x}) \right) - \frac{1}{2} m^2 z^2(\vec{x}) \right] \cdot \int d^D y m z^2(\vec{y}) \right\rangle_{\mathcal{H}_0, C} \\ &= - \int d^D x d^D y \left\langle \left[V_0 \cos \left(\frac{2\pi}{a_\perp} z(\vec{x}) \right) + \frac{1}{2} m^2 z^2(\vec{x}) \right] \cdot m z^2(\vec{y}) \right\rangle_{\mathcal{H}_0, C} \\ &= - \int d^D x d^D y m \langle z(\vec{x}) z(\vec{y}) \rangle_{\mathcal{H}_0}^2 \left\{ m^2 - V_0 \left(\frac{2\pi}{a_\perp} \right)^2 e^{-\frac{2\pi^2}{a_\perp^2} \langle (z(\vec{x}))^2 \rangle_{\mathcal{H}_0}} \right\} \end{aligned}$$

Hinreichend für die Erfüllung dieser Gleichung ist das Verschwinden des Ausdrucks in der geschweiften Klammer. Hierbei ist zu beachten, daß $\langle z^2(\vec{x}) \rangle_{\mathcal{H}_0}$ eine Funktion von m ist.

Wir wollen hier natürlich wieder ein unordnungsgemittelttes Ergebnis haben. Daher müssen wir hier den unordnungsgemittelten Erwartungswert von z^2 verwenden. Somit lautet die Selbstkonsistenzgleichung

$$m^2 = V_0 \left(\frac{2\pi}{a_\perp} \right)^2 e^{-\frac{2\pi^2}{a_\perp^2} \overline{\langle (z(\vec{x}))^2 \rangle}_{\mathcal{H}_0}}. \quad (2.4)$$

Wir berechnen $\overline{\langle z^2(x) \rangle}_{\mathcal{H}_0}$ mit Hilfe der replizierten Hamiltonfunktion.

$$\overline{\langle z^2(x) \rangle}_{\mathcal{H}_0} = \lim_{n \rightarrow 0} \text{Tr} \left((z^\alpha)^2 e^{-\frac{\mathcal{H}_0^n}{T}} \right)$$

Hierzu entwickeln wir die replizierte Hamiltonfunktion bis zur zweiten Ordnung in z^α . Dieses liefert unter der Annahme, daß das z gaußverteilt ist, ein korrektes Ergebnis. Des weiteren transformieren wir noch die Hamiltonfunktion in die Fourierdarstellung, da diese diagonal in den Impulsen \vec{q} ist.

$$\mathcal{H}^n(\vec{q}) = \int \frac{d^D q}{(2\pi)^D} \sum_{\alpha, \beta} \frac{1}{2} \underbrace{\left((\Gamma q^2 + m^2) \delta^{\alpha, \beta} - \frac{2}{T} R''(0) n \right)}_{=:(G^{-1}(\vec{q}))^{\alpha\beta}} z_{\vec{q}}^\alpha z_{-\vec{q}}^\beta$$

Die Mittelung besteht nun im wesentlichen in der Invertierung der Matrix G^{-1} (Anhang 1.3). Wir erhalten

$$\begin{aligned} \overline{\langle z^2(x) \rangle}_{\mathcal{H}_0} &= \int \frac{d^D q}{(2\pi)^D} \lim_{n \rightarrow 0} T \cdot G^{\alpha\alpha}(q) \\ &= \int \frac{d^D q}{(2\pi)^D} \left\{ \frac{T}{\Gamma q^2 + m^2} - \frac{R''(0)}{(\Gamma q^2 + m^2)^2} \right\} \end{aligned} \quad (2.5)$$

Der erste Summand ist dabei der thermische Beitrag zur Rauhigkeit. Aus dem reinen Modell wissen wir, daß der oberhalb von zwei Oberflächendimensionen eine verschwindende Rauhigkeit liefert. Der zweite Summand ist der Unordnungsanteil an der Rauhigkeit. Sein Beitrag ist von der Ordnung T^0 . Er liefert also auch bei $T = 0$ einen Beitrag.

So wie bis jetzt formuliert, wird die Unordnung “nur” störungstheoretisch behandelt. Dieses führt, wie wir bereits aus dem Fall ohne periodisches Potential wissen, zu ungenauen Resultaten aufgrund von vielen lokalen Minima der Hamiltonfunktion. Wir wollen daher für die Unordnung die Ergebnisse der Renormierungsgruppe benutzen. Dabei wird die Kopplungskonstante durch eine effektive Kopplungskonstante ersetzt. Diese effektive Kopplungskonstante ist die Größe, die in der Renormierungsgruppe nach Ausintegration der schnellen Freiheitsgrade definiert wurde. Sie ist dadurch skalenabhängig geworden, weshalb wir besser von einem Kopplungsterm sprechen.

2.1 Drei-Parameter-Approximation

Eine besonders schöne Methode, den effektiven Kopplungsterm zu berechnen, besteht in der Drei-Parameter-Approximation von T. Nattermann und H. Leschhorn [16, 23]. Hierbei wird die funktionale Renormierung auf eine bestimmte Familie von Funktionen eingeschränkt. Die so gefundenen Flußgleichungen für die Parameter dieser Funktionenfamilie sind elementar integrierbar, so daß wir nicht nur den Fixpunkt der Renormierungsgruppe erhalten, sondern auch den Fluß der Parameter dorthin. Ein Nachteil dieser Methode soll nicht verschwiegen werden. Sie ist nur auf solche Unordnungskorrelatoren anwendbar, deren Integral über die ganze z -Achse nicht divergiert. Dieses ist für das Random Bond Problem gewährleistet, wenn man den anfänglichen Unordnungskorrelator durch eine Gaußfunktion darstellt.

Wir beginnen mit einer geeigneten Definition von $D(z)$

$$D(z) = \frac{\Delta}{\xi} r\left(\frac{z}{\xi}\right) \quad r(u) \approx \begin{cases} 1 & |u| \ll 1 \\ 0 & |u| \gg 1 \end{cases} \quad (2.6)$$

Mit dieser Definition führen wir zwei Parameter Δ und ξ ein, die renormiert werden sollen. ξ ist die Korrelationslänge der Unordnung. Δ gibt die Stärke der Unordnung an. Die Funktion r ist kurzreichweitig. Wir verwenden hier später für Rechnungen eine Gaußfunktion. Diesen Ansatz für D setzen wir nun in die Flußgleichung (1.17.a.b) für D aus der funktionalen Renormierung ein. Wir erhalten

$$\begin{aligned} \frac{1}{\xi} r\left(\frac{z}{\xi}\right) \frac{\partial \Delta}{\partial l} - \left[\frac{\Delta}{\xi^2} r\left(\frac{z}{\xi}\right) + \frac{\Delta z}{\xi^3} r'\left(\frac{z}{\xi}\right) \right] \frac{\partial \xi}{\partial l} &= [\epsilon - 4\zeta] \frac{\Delta}{\xi} r\left(\frac{z}{\xi}\right) \\ &+ \frac{\zeta \Delta z}{\xi^2} r'\left(\frac{z}{\xi}\right) + \frac{\Delta^2}{\xi^6} \left[\left(r''\left(\frac{z}{\xi}\right) \right)^2 - 2 r''\left(\frac{z}{\xi}\right) r''(0) \right] \end{aligned}$$

Von dieser Gleichung bestimmt man nun zwei verschiedene Momente bezüglich z . Die einzelnen Summanden der Gleichung sind gerade Funktionen von z , da der Unordnungskorrelator eine gerade Funktion ist. Die Momente, die wir auswählen, müssen gerade sein, da die ungeraden verschwinden. Aus diesen beiden Gleichungen für die Momente können wir nun die Flußgleichungen für die Parameter Δ und ζ gewinnen. Wir erhalten

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Delta}{\partial l} &= [\epsilon - 5\zeta + c_\Delta g] \Delta \\ \frac{\partial \xi}{\partial l} &= [-\zeta + c_\xi g] \xi \end{aligned} \quad (2.7)$$

Hier tauchen drei neue Größen auf: c_Δ , c_ξ und g . Die ersten beiden bestimmt man aus der folgenden Gleichung

$$c_\Delta + m c_\xi = \frac{\int du u^m r''(u) [r''(u) - 2r''(0)]}{\int du u^m r(u)} \quad (2.8)$$

Dabei setzt man für m ganze gerade Zahl ein, die entsprechenden Momente. g ist eine dimensionslose Kopplungskonstante aus der Kombination der beiden Parameter Δ und ξ : $g = \Delta/\xi^5$. Aus den Gleichungen (2.7) läßt sich eine Flußgleichung für g herleiten:

$$\frac{\partial g}{\partial l} = \epsilon g + [c_\Delta - 5c_\xi] g^2. \quad (2.9)$$

Der Fixpunkt dieser Gleichung berechnet sich zu

$$g^* = \frac{\epsilon}{5c_\xi - c_\Delta}. \quad (2.10)$$

Man kann die Flußgleichung nun von $l = 0$ bis $l = \ln(\Lambda L)$ integrieren

$$\int_{g_o}^{\tilde{g}(l)} dg \frac{1}{\epsilon g \left(1 - \frac{g}{g^*}\right)} = \int_0^l dl'$$

und erhält

$$\begin{aligned} \tilde{g}(l) &= \frac{g_o g^* e^{\epsilon l}}{g^* + g_o (e^{\epsilon l} - 1)} \\ \text{mit } g_o &= g(l=0) = \frac{\Delta_0}{\xi_0^5}. \end{aligned} \quad (2.11)$$

Damit können wir nun auch die Flußgleichungen für $\tilde{\Delta}$ und $\tilde{\xi}$ lösen:

$$\begin{aligned} \int_{\tilde{\Delta}_0}^{\tilde{\Delta}(l)} \frac{d\Delta}{\Delta} &= \int_0^l dl' \left\{ \epsilon - 5\zeta + c_\Delta \frac{g_o g^* e^{\epsilon l}}{g^* + g_o (e^{\epsilon l} - 1)} \right\} \\ \int_{\tilde{\xi}_0}^{\tilde{\xi}(l)} \frac{d\xi}{\xi} &= \int_0^l dl' \left\{ -\zeta + c_\xi \frac{g_o g^* e^{\epsilon l}}{g^* + g_o (e^{\epsilon l} - 1)} \right\} \end{aligned}$$

Wir erhalten

$$\begin{aligned} \tilde{\Delta}(\Lambda L) &= \tilde{\Delta}_0 G^{\frac{c}{5-c}}(L) \\ \tilde{\xi}(\Lambda L) &= \tilde{\xi}_0 G^{\frac{1}{5-c}}(L), \end{aligned} \quad (2.12)$$

wobei wir zur Vereinfachung $c := c_\Delta/c_\xi$ und

$$G(L) := 1 + \frac{g_o}{g^*} [(\Lambda L)^\epsilon - 1]$$

definiert haben.

Wir ersetzen nun die Kopplungskonstante $-R''(0)$ in (2.5) durch die aus dem Ansatz (2.6) herrührende. Die Größen Δ und ξ werden durch die unskalierten Versionen der effektiven

Größen (2.12) ersetzt. Wir können nun $\overline{\langle z^2 \rangle}$ für $T = 0$ berechnen:

$$\begin{aligned}\overline{\langle z^2(x) \rangle} &= \int \frac{d^D q}{(2\pi)^D} \frac{\Gamma^2 \Lambda^\epsilon \Delta_0}{K_D \xi_0^3} G^{\frac{\epsilon-3}{5-c}} \left(\frac{1}{q} \right) \frac{1}{(\Gamma q^2 + m^2)^2} \\ &= \frac{\Delta_0}{\xi_0^3} \int_{1/L}^\Lambda dq \frac{\Gamma^2 q^{D-1}}{(\Gamma q^2 + m^2)^2} G^{\frac{\epsilon-3}{5-c}} \left(\frac{1}{q} \right)\end{aligned}\quad (2.13)$$

K_D ist hier wiederum das Volumen der D -dimensionalen Einheitskugel im Impulsraum, dividiert durch $(2\pi)^D$. Die Masse m bewirkt nun, daß die kleinen Impulse abgeschnitten werden. Wir haben also in einem unendlich großen System einen unteren Cutoff von $m/\sqrt{\Gamma}$.

$$\begin{aligned}\overline{\langle z^2(x) \rangle} &\approx \frac{\Delta_0}{\xi_0^3} \int_{m/\sqrt{\Gamma}}^\Lambda dq q^{-1-\epsilon} G^{\frac{\epsilon-3}{5-c}} \left(\frac{1}{q} \right) \\ &= \frac{\xi_0^2}{2c_\xi} \left[G^{\frac{2}{5-c}} \left(\frac{\sqrt{\Gamma}}{m} \right) - 1 \right]\end{aligned}$$

Somit können wir nun die Selbstkonsistenzgleichung aufstellen. Es ist im weiteren nützlich, die konkurrierenden physikalischen Beiträge durch miteinander vergleichbare Längenskalen auszudrücken.

Zuerst einmal haben wir bereits drei Längen in der Gleichung stehen, a_\perp , ξ_0 und $1/\Lambda$. a_\perp ist die Periode des gittersimulierenden Potentials. Es ist somit eine Länge in z -Richtung. Λ ist der obere Impulscutoff, somit ist $1/\Lambda = a_\parallel$ die Gitterkonstante in x -Richtung.

ξ_0 ist das Maximum aus der Breite der Grenzfläche (bei einer Blochwand ist das zum Beispiel die Längenskala, auf der sich die Spins um 180° drehen) und der Korrelationslänge der Unordnung. Auch dieses ist eine Länge in z -Richtung. Diese Länge gibt an, wie stark man die Wand verschieben kann, ohne daß sich der Energiebeitrag der Unordnung drastisch ändert. Nehmen wir zum Beispiel an, wir haben eine Wand der Breite l , die an einem Punktdefekt, welcher zunächst in der Mitte liegen soll, eine gewisse Energie ΔE gewinnt. Wir können nun diese Wand um $\pm d/2$ verschieben. Der Punktdefekt bleibt dadurch in der Wand, wodurch sich der Energiegewinn nicht wesentlich ändert. Analog ist die Betrachtung einer *dünnen* Wand, welche mit Defektstellen endlicher Breite wechselwirkt. (Abbildung 2.1)

Die nächste auftretende Länge in unserem Problem beschreibt die Unordnung. Es ist die sogenannte Larkin-Länge L_L [15]. Das ist die Längenskala, ab der die Unordnung in der Art relevant wird, daß man sie nicht mehr mit der Störungstheorie behandeln kann. Dieses ist dann der Fall, wenn die Rauigkeit W der Wand von der Größenordnung der Gitterkonstante a_\parallel wird.

$$W^2(L) \simeq \frac{2\Delta_o}{\xi_0^3 \epsilon} \left[\left(\frac{L}{a_\parallel} \right)^\epsilon - 1 \right]$$

Setzen wir nun g_o und $g^* \propto \epsilon$ ein, so erhalten wir

$$a_\perp^2 \simeq \xi_0^2 \frac{g_o}{g^*} \left(\frac{L}{a_\parallel} \right)^\epsilon$$

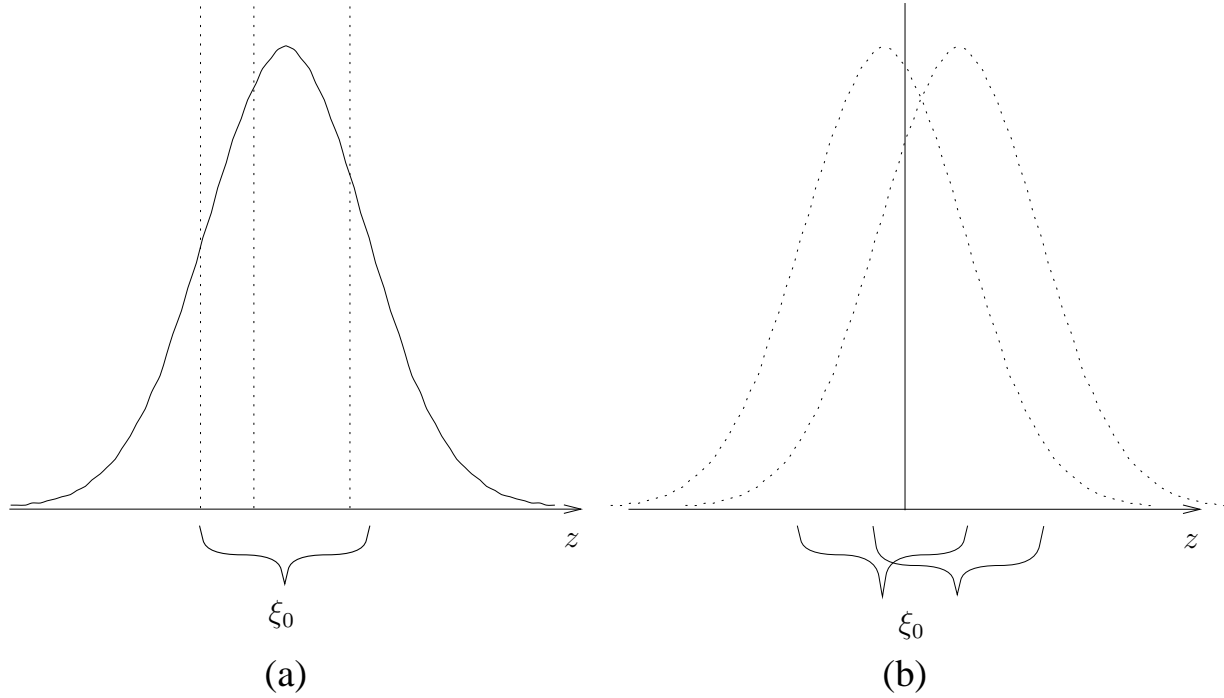


Abbildung 2.1: Die Korrelationslänge ξ_0 : Es gibt zwei Extremfälle. Nehmen wir zunächst (a) an, die Punktdefekte haben eine gewisse Breite ξ_0 (in der Abbildung durch die Gaußkurve dargestellt) und die Position der Wand sei sehr scharf definiert. In diesem Fall kann die Position der Wand im Intervall ξ_0 variieren ohne das sich der Energieanteil der Unordnung dramatisch ändert. Wir haben in der Skizze drei mögliche Positionen als gestrichelte Linien eingezeichnet. Im anderen Fall (b) sind Punktdefekte sehr schmal und die Wand hat eine Breite ξ_0 . Auch hier ist es möglich, die Wand in diesem Intervall zu verschieben. In der Abbildung (b) ist die durchgezogene Linie die Position der Defektstelle. Die gestrichelten Linien zeigen exemplarisch zwei mögliche Positionen der Wand.

Wir definieren daher die Larkin-Länge als

$$L_L := a_{\parallel} \left(\frac{g^*}{g_0} \left(\frac{a_{\perp}}{\xi_0} \right)^2 \right)^{1/\epsilon} \quad (2.14)$$

Wir sehen, daß eine schwache Unordnung einer großen Larkin-Länge und eine starke einer kleinen Larkin-Länge entspricht. Weiterhin wird die Larkinlänge mit wachsender Korrelationslänge ξ_0 kleiner. Die Auswirkungen der Unordnung sind also um so stärker, je breiter die Defektstellen sind.

Die letzte Längenskala ist dadurch gegeben, daß die Wand eine gewisse Distanz in \vec{x} -Richtung benötigt, um von einem Minimum des periodischen Potentials zum nächsten zu gelangen [24]. Diese Länge ist geprägt von der Konkurrenz zwischen der elastischen Energie und dem periodischen Potential. Der elastische Term versucht die Wand zu glätten,

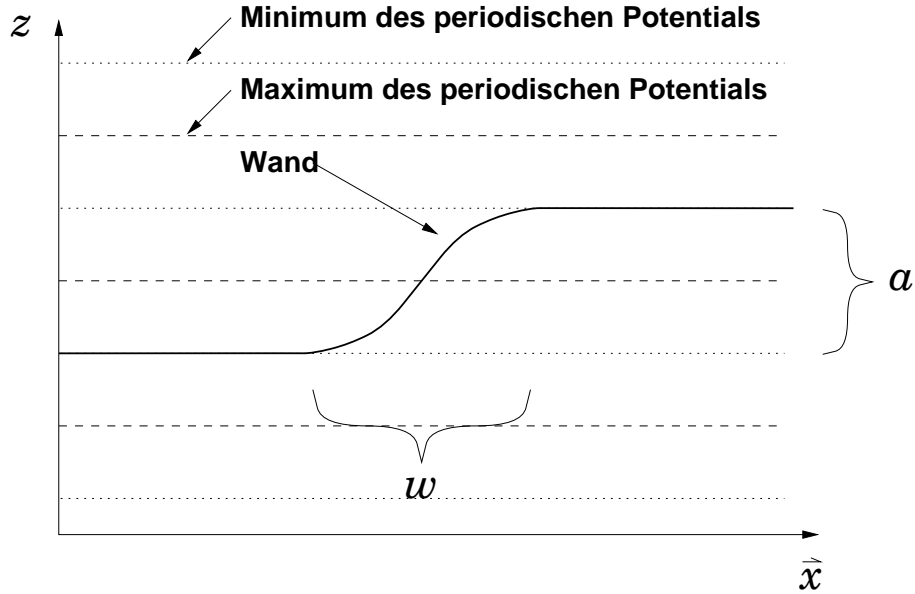


Abbildung 2.2: Die Längenverhältnisse, die beim Wechsel der Oberfläche von einem Minimum zum nächsten des Periodischen Potentials auftreten. Eine solche Stelle wird als Stufe oder Kink bezeichnet.

wodurch der Übergang zwischen zwei Minima des periodischen Potentials in die Länge gezogen wird. Das periodische Potential wirkt diesem entgegen. Der Energieverlust durch dieses Potential ist proportional zur Breite dieser Stufe. Die typische Breite der Stufe ist nun dadurch bestimmt, daß die Energiebeiträge der beiden Terme von der gleichen Größe sind. Der Beitrag der elastischen Energie ist proportional zur Breite w , multipliziert mit dem typischen Gradienten zum Quadrat $(a_{\perp}/w)^2$. Mit den Vorfaktoren V_0 und Γ erhalten wir also

$$w \sim a_{\perp} \sqrt{\frac{\Gamma}{V_0}} \quad (2.15)$$

Zuletzt skalieren wir noch den Variationsparameter m zu einer dimensionslosen Größe p um. Wir dividieren dazu m durch den Vorfaktor der Exponentialfunktion auf der rechten Seite von Gleichung (2.4) und definieren dieses als p^2 .

$$p := m \frac{a_{\perp}}{2\pi} \frac{1}{\sqrt{V_0}} \quad (2.16)$$

Der physikalisch relevante Bereich, in dem p liegen kann, liegt zwischen 0 und 1. Bei $p = 1$ entspricht die Variations-Hamiltonfunktion \mathcal{H}_0 einer Entwicklung des periodischen Potentials in der ursprünglichen Hamiltonfunktion \mathcal{H} bis zur quadratischen Ordnung in z . Werte von p , die größer als 1 sind, würden bedeuten, daß das periodische Potential die Rauigkeit unserer Wand stärker unterdrückt als das Parabelpotential der Variations-Hamiltonfunktion. Dieses ist physikalisch unsinnig: Der Energieverlust pro Wandfläche für

eine rauhe Wand bleibt im periodischen Potential immer endlich. Im Parabelpotential wird er hingegen für beliebig große Auslenkungen beliebig groß.

Wir haben nun alle Größen, um die Selbstkonsistenzgleichung (2.4) aufzuschreiben:

$$p^2 = \exp \left(-\frac{\pi^2}{c_\xi} \left(\frac{\xi_0}{a_\perp} \right)^2 \left\{ \left[1 + \left(\frac{a_\perp}{\xi_0} \right)^2 \left(\frac{L_L}{a_\parallel} \right)^{-\epsilon} \left[\left(\frac{w}{2\pi a_\parallel p} \right)^\epsilon - 1 \right] \right]^{\frac{2}{5-c}} - 1 \right\} \right). \quad (2.17)$$

Die auftretenden Größen sind nun entweder dimensionslos, wie p und die Konstanten c und c_ξ , oder Längenverhältnisse. Die Längen werden in den natürlichen Einheiten des Systems gemessen. Dieses sind die Gitterkonstanten in der entsprechenden Richtungen: L_L und w werden mit a_\parallel , ξ_0 mit a_\perp gemessen.

Wir müssen jetzt noch die Konstanten c_ξ und c mit Hilfe von Gleichung (2.8) bestimmen. Um diese exakt zu bestimmen, wäre es notwendig, die exakte Fixpunktfunktion für $r(u)$ einzusetzen. Diese ist jedoch analytisch nicht bestimmbar und liegt somit nur numerisch vor. Wir müssen also eine geeignete Näherung für diese Funktion finden. Hieraus folgt, daß die Konstanten nun von der Wahl der Momente m abhängt. Wir setzen an:

$$\tilde{r}^*(u) = \exp \left(-\frac{u^2}{2} \right)$$

Der Nachteil dieser Funktion ist, daß sie im Gegensatz zur tatsächlichen Fixpunktfunktion am Ursprung analytisch ist. Die richtige Fixpunktfunktion zeigt hier eine Divergenz in der vierten Ableitung. Man sollte daher $m \neq 0$ wählen. Die Abhängigkeit von m bei der genäherten Fixpunktfunktion ist allerdings sehr gering. Mit den Momenten 2 und 4 erhalten wir

$$\begin{aligned} c &= 0.1885 \dots \\ c_\xi &= 2.1105 \dots \end{aligned}$$

Der hieraus resultierende Rauigkeitsexponent

$$\zeta = \frac{1}{5-c} \epsilon \approx 0.2078 \epsilon$$

kommt recht nahe an Fishers Ergebnis [7] von 0.2083ϵ .

2.2 Auswertung der Selbstkonsistenzgleichung

Wir wollen nun die Selbstkonsistenzgleichung (2.17) analysieren und deren Lösungen finden. Zunächst stellen wir ein paar allgemeine Überlegungen an. Wir betrachten die ursprüngliche

Form der Selbstkonsistenzgleichung (2.4). Mit dem reskalierten Variationsparameter p lautet sie

$$p^2 = \exp \left(-\frac{2\pi^2}{a_{\perp}^2} \overline{\langle z^2(\vec{x}) \rangle} \right).$$

Weil ihr Argument immer negativ ist, ist die Exponentialfunktion ihrerseits immer kleiner als eins. Somit ist die Bedingung, daß für eine physikalische sinnvolle Lösung p kleiner als eins sein muß, immer erfüllt. Bei der Berechnung von $\overline{\langle z^2(\vec{x}) \rangle}$ wurde eine Näherung gemacht, die nicht allgemein gültig ist. Im Integral über die Impulse (2.13) ist die untere Integralgrenze durch die Masse modifiziert worden. Dieses ist jedoch nur dann sinnvoll, wenn $m/\sqrt{\Gamma}$ kleiner als die obere Abschneidefrequenz der Impulse ist. Für größere Werte wird die Näherung extrem schlecht und bewirkt zum Beispiel, daß das Argument der Exponentialfunktion in der Selbstkonsistenzgleichung (2.17) negativ werden kann, wodurch Lösungen $p > 1$ folgen. Die Bedingung $m/\sqrt{\Gamma} < \Lambda$ übersetzt sich in die Bedingung

$$p \leq \frac{w}{2\pi a_{\parallel}} \quad (2.18)$$

für die neu definierten Größen. Bei Gleichheit ist der Wert der Parameter erreicht, bei dem die Exponentialfunktion in Gleichung (2.17) gleich eins wird.

Zunächst wollen wir den Fall $D > 4$ betrachten. ϵ ist in diesem Fall negativ, so daß die Exponentialfunktion für alle p analytisch ist. Sie fällt mit p aufgrund des negativen Vorzeichens im Exponenten und konvergiert gegen null für $p \rightarrow \infty$. Die Gleichung hat somit also immer eine Lösung $p > 0$. Ein Beispiel für konkrete Werte der vorkommenden Größen zeigt Abbildung 2.3. Die Grenzfläche ist für diesen Fall also immer glatt, wie wir erwartet haben.

Kommen wir nun zum Fall $D < 4$. In diesem Fall ist ϵ größer als null. Das Argument der Exponentialfunktion ist an der Stelle $p = 0$ nicht analytisch. Es divergiert gegen $-\infty$ für $p \rightarrow 0$, wodurch die Exponentialfunktion selber null wird. $p = 0$ ist also immer eine Lösung des Systems. Es verschwinden alle Ableitungen der Funktion im Grenzwert $p \rightarrow 0$. Es kann also nicht passieren, daß eine weitere Lösung aus der Null "herauswandert", wie es zum Beispiel bei der Mean-Field Behandlung des reinen Ising-Systems der Fall ist.

Für größer werdende p hat man das Problem, das irgendwann die Bedingung (2.18) nicht mehr erfüllt ist. In diesem Fall ist die Näherung zu verwerfen und man muß das Integral numerisch behandeln.

Das typische Aussehen der Selbstkonsistenzgleichung zeigt Abbildung 2.4. Dort ist ein Fall gezeigt, wo die Gleichung drei Lösungen hat, eine Lösung für $p = 0$ und zwei für nichtverschwindende p . Die $p = 0$ Lösung existiert für alle möglichen Werte der Parameter L_L , ξ und w . Die Existenz der anderen beiden Werte $p_1 < p_2$ ist von diesen Parametern abhängig. Die Wahl der Parameter bestimmt wie "schnell" bzw. steil die Exponentialfunktion wächst.

Wir wollen nun untersuchen, wie sich die Lösungen p_1 und p_2 bei kleinen Variation der Parameter L_L , ξ_0 und w verändern. Erhöhen wir w , dieses entspricht einem schwächeren

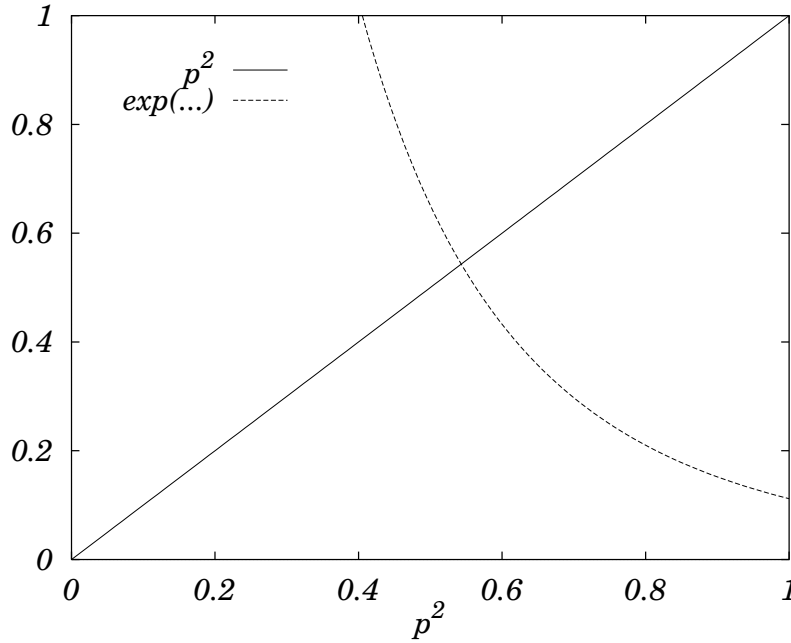


Abbildung 2.3: Die Abbildung zeigt das typische Aussehen der Selbstkonsistenzgleichung für Dimensionen $D > 4$. Hier wurde speziell $D = 5$, $w/a_{||} = 4$, $L_L/a_{||} = 2$ und $\xi_0/a_{\perp} = 5$ gewählt. Auf der Abszisse wird p^2 , auf der Ordinate p^2 beziehungsweise die Exponentialfunktion aufgetragen. Der Schnittpunkt der beiden Kurven ist die Lösung der Gleichung.

periodischen Potential, so wird p_2 kleiner und p_1 größer. Wir schließen daraus, daß die größere der beiden Lösungen, also p_2 , die physikalische Lösung ist: Ein kleineres p unterdrückt die Rauigkeit weniger als ein großes. Weiterhin bewirkt ein schwächeres periodisches Potential eine größere Rauigkeit als ein starkes. Dieses beiden Tatsachen treffen für p_2 zu. Analog ist das Verhalten bei Änderung von ξ_0 und L_L . Erhöht man ξ_0 oder senkt man L_L , so wird in beiden Fällen p_2 kleiner und p_1 größer. Dieses paßt ebenfalls in das physikalische Bild: Eine stärkere Unordnung sollte eine größere Rauigkeit und somit ein kleineres p zur Folge haben. Bei beiden Fällen erhöht man die Unordnung, einmal, indem man ihren "Einflußbereich" vergrößert (ξ_0 erhöht) und zum anderen indem man den numerischen Wert der Unordnung erhöht (L_L kleiner macht).

Der Phasenübergang ist genau die Wertekombination von ξ , L_L und w bei der eine Lösung $p \neq 0$ zum ersten mal auftritt. Betrachten wir die Gleichung (2.4), so stellen wir fest, daß, wenn die Exponentialfunktion für irgendeinen Wert der Masse m ungleich null ist, wir mit einem genügend großen V_0 einen Schnittpunkt zwischen dieser und p^2 erreichen können. Die Frage nach der Existenz eines Phasenübergangs reduziert sich hierdurch auf die Frage, unter welchen Bedingungen die Exponentialfunktion für alle p den Wert null annimmt. Dieses ist wiederum genau dann der Fall, wenn das Argument der Exponentialfunktion nach $-\infty$ divergiert. Die Divergenz muß wegen dem oben gesagten unabhängig für alle p auftreten. Dieses ist der Fall, wenn die Larkin-Länge L_L gegen null geht oder die Korrelationslänge

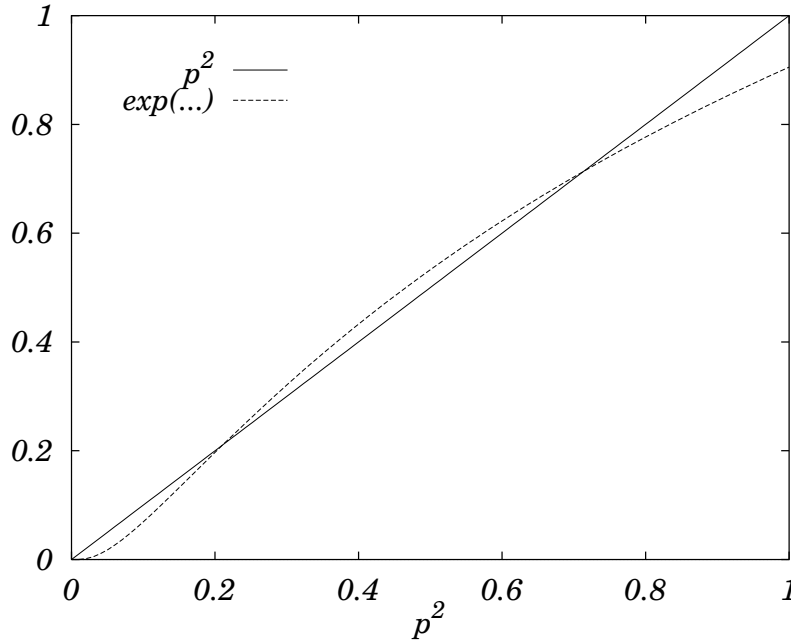


Abbildung 2.4: Hier ist eine Situation für $D < 4$ gezeigt. Die Auftragungsart ist dieselbe wie in Abbildung 2.3. Hier hat sich das Verhalten der Exponentialfunktion drastisch geändert, so daß es bis zu drei Schnittpunkten gibt.

ξ_0 divergiert. Beides entspricht einer unendlich großen Unordnung und ist somit nicht realisierbar. Eine andere Möglichkeit wäre eine Divergenz der Länge w . Man kann dieses durch $V_0 \rightarrow 0$ oder $\Gamma \rightarrow \infty$ erreichen. Es handelt sich also auch hier um nicht allzu sinnvolle Grenzwerte, da zum einen kein periodisches Potential vorhanden ist und zum anderen die Wand unendlich steif und somit immer glatt ist.

Beschränken wir uns auf endliche, von null verschiedene Werte der Parameter, so ist die Exponentialfunktion außer bei $p = 0$ von null verschieden. Somit gibt es für diese Wahl der Parameter immer einen durch das periodische Potential V getriebenen Phasenübergang.

Wir stellen nun die Länge w , die die Stärke des periodischen Potentials beschreibt, als Funktion der anderen beiden Längen ξ_0 und L_L dar. Für fest vorgegebene Werte der Korrelations- und Larkin-Länge bestimmen wir den maximalen Wert $w(\xi_0, L_L)$ bei dem es in Abbildung 2.4 noch einen Schnittpunkt zwischen den eingezeichneten Kurven gibt. In diesem Fall tangiert die Exponentialfunktion die Gerade. Dieses maximale w stellt somit einen Phasenübergang zwischen einer glatten Phase, bei der $p \neq 0$ ist, und einer rauhen mit $p = 0$ dar. Der Phasenübergang ist diskontinuierlich, das heißt, p springt von einem endlichen Wert auf null.

Hieraus ergibt sich ein Phasendiagramm, wie es Abbildung 2.5 zeigt. Die dargestellte Fläche ist die Grenzfläche zwischen der rauhen (oberhalb) und der glatten Phase (unterhalb). Wir sehen, daß eine stärkere Unordnung, das heißt eine kleinere Larkin-Länge L_L , eine stärkeres periodisches Potential benötigt (kleineres w), um in eine glatte Phase zu gelangen.

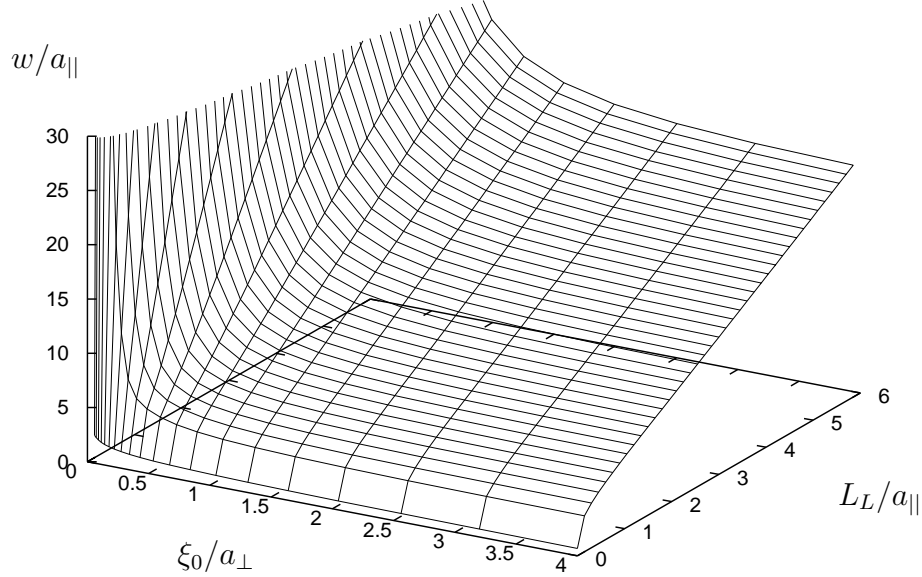


Abbildung 2.5: Das Phasendiagramm: unterhalb der dargestellten Fläche ist der Ordnungsparameter $p \neq 0$. Dieses bedeutet, daß sich das System in der glatten Phase befindet. Oberhalb der eingezeichneten Fläche ist das System rau. Bei der Berechnung dieses Diagramms wurde das Integral (2.13) numerisch ausgewertet.

Bemerkenswert ist die Abhängigkeit des Phasenübergangs von der Korrelationslänge ξ_0 . Ist diese groß gegenüber der Gitterkonstanten des periodischen Potentials a_\perp , so ist die Abhängigkeit sehr gering. Für Werte $\xi < a_\perp$ zeigt sich demgegenüber eine sehr starke Abhängigkeit. In diesem Fall reicht schon ein verhältnismäßig kleines Potential, um die Wand zu glätten. Ist die Korrelationslängen von der Größenordnung des Gitterkonstante oder größer, so scheint die Unordnung einen Teil des periodischen Potentials “herauszumitteln”, weshalb der numerische Wert V_0 größer sein muß, um eine glatte Wand zu erhalten.

Bei Random Field Unordnung haben wir die Möglichkeit, das Fixpunktergebniss der Unordnung zur Auswertung von Gleichung 2.4 zu verwenden. Wir erhalten eine Flußgleichung, die keinen Parameter enthält, welcher die Stärke der Unordnung genauer charakterisiert.

$$m^2 = V_0 \left(\frac{2\pi}{a_\perp} \right)^2 \cdot \exp \left(- \left(\frac{2\pi}{a_\perp} \right)^2 \frac{\epsilon}{4\zeta} \left(\left(\frac{\Lambda\sqrt{\Gamma}}{m} \right)^{2\zeta} - 1 \right) \right)$$

Die Überlegungen bei Random Bond Unordnung bezüglich des periodischen Potentials sind weiterhin gültig. Somit haben wir auch hier einen durch V_0 getriebenen Phasenübergang.

Für ein V_0 , welches kleiner als ein kritisches V_c ist, ist die Oberfläche rau, für ein V_0 größer als V_c glatt. Dieser Phasenübergang ist ebenfalls diskontinuierlich.

Wir wollen nun versuchen, ob man auch aus der Renormierungsgruppenrechnung einen Phasenübergang herleiten kann. Wir ändern dazu die replizierte Hamiltonfunktion (1.12) derart ab, daß wir noch einen Masseterm $\int d^D x \, 1/2 m^2 z^2(\vec{x})$ einfügen.

$$\mathcal{H}^n = \int d^D x \left\{ \sum_{\alpha} \frac{1}{T} \left[\frac{\Gamma}{2} (\nabla z^{\alpha}(\vec{x}))^2 + \frac{1}{2} m^2 (z^{\alpha}(\vec{x}))^2 - V_0 \cos \left(\frac{2\pi}{a_{\perp}} z^{\alpha}(\vec{x}) \right) \right] - \frac{1}{2T^2} \sum_{\alpha, \beta} R(z^{\alpha}(\vec{x}) - z^{\beta}(\vec{x})) \right\} \quad (2.19)$$

Mit dieser neuen Hamiltonfunktion führen wir nun die funktionale Renormierung genau wie in Kapitel 1.5.2 durch. Das Einzige, was sich ändert, ist der zu verwendende Propagator.

$$\frac{1}{\Gamma q^2} \rightarrow \frac{1}{\Gamma q^2 + m^2}$$

Wir ersetzen in Gleichung (1.14) die beiden Propagatoren und fahren mit denselben Näherungen fort. Letztendlich bleibt ein Integral der Art

$$\int d^D q \frac{1}{(\Gamma q^2 + m^2)^2}$$

übrig. Dieses Integral ist uns schon aus der Variationsrechnung bekannt. Es bewirkt, daß die untere Impulsabschneidefrequenz sich bei hinreichend großer Masse m auf $m/\sqrt{\Gamma}$ erhöht. Die Flußgleichungen (1.16.a.b) und (1.16.a.c) ändern sich hierdurch der Art, daß die Terme, die die zweiten Ableitungen von V beziehungsweise R enthalten, in diesem Fall wegfallen.

$$\begin{aligned} \frac{\partial \tilde{R}}{\partial l} &= (\epsilon - 4\zeta) \tilde{R} + \zeta \tilde{z} \tilde{R}' + \frac{1}{2} \frac{K_D}{\Gamma^2} \Lambda^{-\epsilon} \left[\tilde{R}''^2(\tilde{z}) - 2\tilde{R}''(\tilde{z}) \tilde{R}''(0) \right] \Theta \left(\frac{\Lambda}{e^l} - \frac{m}{\sqrt{\Gamma}} \right) \\ \frac{\partial \tilde{V}}{\partial l} &= (2 - 2\zeta) \tilde{V} + \zeta \tilde{z} \tilde{V}' - \frac{1}{2} \frac{K_D}{\Gamma^2} \Lambda^{-\epsilon} \tilde{V}''(\tilde{z}) \tilde{R}''(0) \Theta \left(\frac{\Lambda}{e^l} - \frac{m}{\sqrt{\Gamma}} \right) \end{aligned} \quad (2.20)$$

Θ ist die Stufenfunktion, die für positive Argumente den Wert 1 annimmt und sonst null ist. Sie bewirkt hier die Fallunterscheidung zwischen massivem und masselosen Fall. Für $l \rightarrow \infty$ fällt der letzte Term bei einer endlichen Masse immer weg.

Was bedeutet das nun für das System? Ohne die Masse m liefert das Integral (1.14) im thermodynamischen Limes für den Grenzwert $l \rightarrow \infty$ die divergenten Beiträge, welche die Unordnung als auch das periodische Potential auf nichttriviale Art renormieren. Diese Divergenzen treten mit Masse nicht mehr auf, da die Impulse nun nach unten beschränkt sind. Das bedeutet, daß die Renormierung bei einem endlichen Wert des Flußparameters l stoppt. Dieses l entspricht einer endlichen Längenskala, ab der sich die effektiven Kopplungskonstanten des Systems nicht mehr ändern. Die Oberfläche bleibt in diesem Fall also glatt.

Die Frage, die noch zu klären bleibt, ist, welchen Wert hat die Masse m ? Der Term, der uns diesen liefern kann, ist das periodische Potential. In einer einfachen Störungsrechnung würde uns die zweite Ableitung an der Stelle $z = 0$ diesen Term liefern

$$m^2 = \left. \frac{\partial^2}{\partial z^2} V(z) \right|_{z=0} = V_0 \left(\frac{2\pi}{a_\perp} \right)^2.$$

Wir verwenden hier, um die Masse zu bestimmen, ein mit dem massiven Propagator renormiertes V_0 . Das Vorgehen ist dasselbe wie in Abschnitt 1.8 mit dem Unterschied, daß die Masse mitgenommen wird. Somit enden wir bei der Flußgleichung für V_0

$$\frac{dV_0}{dq_0} = \frac{1}{2} \Lambda^{2\zeta} \left(\frac{2\pi}{a_\perp} \right)^2 \epsilon q_0^{-2\zeta-1} V_0 \Theta \left(q_0 - \frac{m}{\sqrt{\Gamma}} \right) \quad (2.21)$$

In der Stufenfunktion wurde $e^l = \Lambda/q_0$ ersetzt. Die folgende Impulsintegration wird wieder durch die Masse nach unten begrenzt. Somit erhalten wir

$$m^2 = V_0 \left(\frac{2\pi}{a_\perp} \right)^2 \cdot \exp \left(- \left(\frac{2\pi}{a_\perp} \right)^2 \frac{\epsilon}{4\zeta} \left(\left(\frac{\Lambda\sqrt{\Gamma}}{m} \right)^{2\zeta} - 1 \right) \right) \quad (2.22)$$

Mit diese Gleichung ist nun die Masse m selbstkonsistent zu bestimmen. Es ist die Gleichung, welche wir erhalten würden, wenn wir im vorangehenden Kapitel den unordnungsgemittelten Erwartungswert $\overline{\langle z^2 \rangle}$ nicht mit der drei Parameter Approximation, sondern ‘nur’ mit dem Fixpunktresultat der Renormierungsgruppe für die Unordnung, berechnet hätten. Was diese Methode nicht liefert, ist der Crossover von kleinen zu großen Längenskalen. Diesen erhält man nur dann, wenn man die Flußgleichungen der Funktionalen Renormierung simultan integriert. Das ist aber nicht ohne weitere Vereinfachungen, wie eben der drei Parameter Approximation, möglich. Somit hat sich der Kreis geschlossen.

Kapitel 3

Zusammenfassung

In dieser Arbeit wurde eine elastische Oberfläche in einem ungeordneten Medium mit einem zusätzlichen periodischen Potential untersucht. Ziel dieser Arbeit war es, die Existenz eines Phasenübergangs zwischen einer rauen und einer glatten Phase zu beleuchten. Die obere kritische Dimension für dieses System ist $D=4$, genau wie im Fall ohne periodisches Potential [7]. Oberhalb dieser Dimension ist sowohl das periodische Potential als auch die Unordnung irrelevant.

Zunächst wurde das Problem mithilfe der funktionalen Renormierung untersucht. Dabei wird die Abweichung von der kritischen Dimension als kleiner Parameter $\epsilon = 4 - D$ genommen, und nach diesem bis zur führenden Ordnung entwickelt. Hieraus resultieren Flußgleichungen für die Temperatur T , das periodische Potential und die Unordnung. Das System wird durch einen $T = 0$ Fixpunkt beschrieben. Die Flußgleichungen für die anderen beiden Größen sind partielle Differentialgleichungen. Die Beschreibung der Unordnung wird nicht durch das periodische Potential beeinflusst. Somit ergibt sich hierfür derselbe Fixpunkt wie bei D.S. Fisher [7]. Die Flußgleichung des periodischen Potentials läßt sich auf einer Flußgleichung der Kopplungskonstante V_0 dieses Potentials reduzieren. Diese wiederum liefert, einen stabilen Fixpunkt $V_0 = 0$. Somit ist das periodische Potential immer irrelevant.

Eine zweite Methode, mit der das Problem behandelt wurde, ist die Variationsmethode. Das periodische Potential wurde durch ein quadratisches ersetzt. Die dazugehörige Kopplungskonstante m wurde dabei so bestimmt, daß ein geeignetes Variations-Funktional minimal wird. Die Unordnung wurde bei dieser Rechnung weiterhin mithilfe der Renormierungsgruppe behandelt. Diese wurde derart abgeändert, daß der Funktionenraum, in dem sich der Korrelator der Unordnung befindet, derart beschränkt wurde, daß sich die Renormierungsgruppe auf die Renormierung dreier Konstanten reduziert. Die drei Konstanten sind die Temperatur T , die Stärke der Unordnung Δ und die Breite der Defektstellen ξ . Diese Approximation bietet sowohl Vor- als auch Nachteile: Der wichtigste Vorteil ist, daß nun der Übergang (Crossover) von kleinen zu großen Längenskalen berechnet werden kann. Der größte Nachteil ist, daß hiermit nur lokale Unordnungs-korrelatoren, wie sie bei der Random Bond Unordnung auftreten, betrachtet werden können. Das Ergebnis dieser Rechnungen ist, daß es Unterhalb

von $D = 4$ Oberflächendimensionen einen Phasenübergang erster Art zwischen einer rauhen und einer glatten Phase gibt. Was diese Rechnung nicht liefert, ist eine untere kritische Dimension, ab der das periodische Potential immer irrelevant ist.

In einem weiteren Abschnitt wurde versucht, auch aus der Renormierungsgruppenrechnung einen Phasenübergang herzuleiten. Zu diesem Zweck ist die Hamiltonfunktion durch einen Masseterm erweitert worden. Dieser Term bewirkt, daß die Renormierung auf einer durch die Masse bestimmten Längenskala zum Erliegen kommt. Versucht man nun diese Masse aus den im ursprünglichen Modell vorhandenen Größen zu extrahieren, so endet man wiederum bei einer selbstkonsistent zu lösenden Gleichung. Im Gegensatz zur Variationsrechnung enthält diese nur die Fixpunktwerte der Unordnung und keinen Crossover.

Anhang

1.1 Das Variations-Funktional

Angenommen, wir haben zwei Hamiltonfunktionen \mathcal{H} und \mathcal{H}_0 . Wir benötigen ein Funktional dieser beiden Funktionen, welches für $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0$ sein Minimum annimmt.

Durch die beiden Hamiltonfunktionen werden zwei Verteilungsfunktionen definiert:

$$\begin{aligned}\rho &= \frac{e^{-\mathcal{H}/T}}{Z} & Z &= \text{Tr } e^{-\mathcal{H}/T} \\ \rho_0 &= \frac{e^{-\mathcal{H}_0/T}}{Z_0} & Z_0 &= \text{Tr } e^{-\mathcal{H}_0/T}\end{aligned}$$

Wir betrachten nun

$$\rho_0 \cdot (\ln \rho_0 - \ln \rho) = \rho_0 \cdot \ln \frac{\rho_0}{\rho}.$$

Weiterhin benutzen wir die bekannte Ungleichung für Logarithmen

$$\ln x \leq x - 1 \quad \Rightarrow \quad \ln x \geq 1 - \frac{1}{x}$$

und erhalten

$$\rho_0 \cdot (\ln \rho_0 - \ln \rho) \geq \rho_0 - \rho. \tag{1.1}$$

Die Spur über die rechte Seite dieser Ungleichung verschwindet, da beides auf eins normierte Verteilungsfunktionen sind. Somit ist die Spur über die linke Seite immer größer gleich null.

$$\begin{aligned}0 &\leq \text{Tr } \{\rho_0 \cdot (\ln \rho_0 - \ln \rho)\} \\ &= \text{Tr } \left\{ \rho_0 \cdot \left(-\ln Z_0 - \frac{\mathcal{H}_0}{T} + \ln Z + \frac{\mathcal{H}}{T} \right) \right\} \\ &= \ln Z - \ln Z_0 + \frac{1}{T} \langle \mathcal{H} - \mathcal{H}_0 \rangle_{\mathcal{H}_0}\end{aligned}$$

$\langle \dots \rangle_{\mathcal{H}_0}$ bedeutet, daß der Erwartungswert mit \mathcal{H}_0 gebildet wird. Multiplizieren wir dieses Funktional mit T und nehmen nur die Anteile mit, die von \mathcal{H}_0 abhängen, so erhalten wir ein für die Variationsrechnung geeignetes Funktional

$$\boxed{F^{\text{var}} = F_0 + \langle \mathcal{H} - \mathcal{H}_0 \rangle_{\mathcal{H}_0}},$$

wobei $F_0 = -T \ln Z_0$ die Freie Energie des durch \mathcal{H}_0 beschriebenen Systems ist. Die Ungleichung (1.1) ist genau dann eine Gleichung, wenn $\rho = \rho_0$ ist. Somit ist das Variations-Funktional genau dann minimal, wenn $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0$ gilt. Ebenfalls sind in diesem Fall die drei Freien Energien F^{var} , F_0 und F gleich.

1.2 Erwartungswert von $\cos(2\pi z/a)$

Wir wollen den Erwartungswert von $\cos(2\pi z/a)$ bezüglich einer in z quadratischen Hamiltonfunktion \mathcal{H} berechnen.

$$\left\langle \cos\left(\frac{2\pi}{a}z\right) \right\rangle_{\mathcal{H}} = \frac{\text{Tr} \cos(2\pi z/a) e^{-\mathcal{H}/T}}{\text{Tr} e^{-\mathcal{H}/T}}$$

Der dazugehörige Boltzmannfaktor hat eine gaußsche Form. Somit ist das Wick Theorem anwendbar. Zu Beginn zerlegen wir den Kosinus in seine Reihenentwicklung

$$\left\langle \cos\left(\frac{2\pi}{a}z\right) \right\rangle_{\mathcal{H}} = \sum_n \frac{1}{2n!} (-1)^n \left(\frac{2\pi}{a}\right)^{2n} \langle z^{2n} \rangle_{\mathcal{H}}$$

Der Erwartungswert von $\langle z^{2n} \rangle_{\mathcal{H}}$ berechnet sich nun mit dem Wick Theorem: Man muß die Erwartungswerte aller möglichen Paarungen von z berechnen. Da alle z gleich sind ist dieses besonders einfach, nämlich gleich $\langle z^2 \rangle^n$ multipliziert mit der Anzahl der Möglichkeiten, die z zu paaren. Für das erste z hat man $2n - 1$ mögliche Partner. Es bleiben $2n - 2$ z übrig. Somit gibt es für das zweite Paar $2n - 3$ Möglichkeiten. Führt man dieses Verfahren für alle z durch, so erhält man insgesamt $(2n - 1)!!$ Möglichkeiten.

$$\left\langle \cos\left(\frac{2\pi}{a}z\right) \right\rangle_{\mathcal{H}} = \sum_n \frac{1}{2n!} (-1)^n \left(\frac{2\pi}{a}\right)^{2n} (2n - 1)!! \langle z^2 \rangle_{\mathcal{H}}^n$$

Zuletzt wollen wir versuchen, durch geschickte Umformungen die Summe wieder aufzusummieren. Wir zerlegen die Fakultät in zwei Doppelfakultäten. Die ungerade der beiden kürzen wir gegen die bereits vorhandene Doppelfakultät. Die gerade zerlegen wir in $2^n n!$.

$$\left\langle \cos\left(\frac{2\pi}{a}z\right) \right\rangle_{\mathcal{H}} = \sum_n \frac{1}{n!} \left(-\frac{1}{2} \left(\frac{2\pi}{a}\right)^2 \langle z^2 \rangle_{\mathcal{H}} \right)^n$$

Diese Summe identifizieren wir als Exponentialfunktion.

$$\left\langle \cos \left(\frac{2\pi}{a} z \right) \right\rangle_{\mathcal{H}} = \exp \left(-\frac{1}{2} \left(\frac{2\pi}{a} \right)^2 \langle z^2 \rangle_{\mathcal{H}} \right)$$

Analog berechnet sich der Erwartungswert

$$\left\langle z_1^2 \cos \left(\frac{2\pi}{a} z_2 \right) \right\rangle_{\mathcal{H}, C}.$$

Weil hier eine Kumulate berechnet wird, ist zu beachten, daß zunächst die beiden z_1 mit jeweils einem z_2 gepaart werden. Man erhält:

$$\left\langle z_1^2 \cos \left(\frac{2\pi}{a} z_2 \right) \right\rangle_{\mathcal{H}, C} = \langle z_1 z_2 \rangle_{\mathcal{H}, C}^2 \left(\frac{2\pi}{a} \right)^2 \exp \left(-\frac{1}{2} \left(\frac{2\pi}{a} \right)^2 \langle z_2^2 \rangle_{\mathcal{H}, C} \right)$$

1.3 Matrixinversion

Gegeben sei eine quadratische $n \times n$ Matrix

$$M^{\alpha\beta} = a\delta^{\alpha\beta} + b, \quad (1.2)$$

von der die inverse Matrix zu bestimmen ist. Wir nehmen an, daß die Inverse dieselbe Struktur besitzt.

$$(M^{-1})^{\alpha\beta} = x\delta^{\alpha\beta} + y \quad (1.3)$$

Es muß gelten

$$I_n = M \cdot M^{-1} = M^{-1} \cdot M,$$

wobei I_n die $n \times n$ Einheitsmatrix ist. Für die einzelnen Elemente der Matrix gilt daher

$$\delta^{\alpha\beta} = (M \cdot M^{-1})^{\alpha\beta} = \sum_{\gamma} M^{\alpha\gamma} (M^{-1})^{\gamma\beta}.$$

Nach Einsetzen von (1.2) und (1.3) erhalten wir

$$\begin{aligned} \delta^{\alpha\beta} &= \sum_{\gamma} \{ a \cdot x \cdot \delta^{\alpha\gamma} \cdot \delta^{\gamma\beta} + a \cdot y \cdot \delta^{\alpha\gamma} + b \cdot x \cdot \delta^{\gamma\beta} + b \cdot y \} \\ &= a \cdot x \cdot \delta^{\alpha\beta} + a \cdot y + b \cdot x + n \cdot b \cdot y. \end{aligned}$$

Dieses Gleichungssystem hat die eindeutige Lösung

$$x = \frac{1}{a}$$
$$y = -\frac{b}{a \cdot (a + n \cdot b)}.$$

Somit lautet die gefundene Inverse

$$(M^{-1})^{\alpha\beta} = \frac{1}{a}\delta^{\alpha\beta} - \frac{b}{a \cdot (a + n \cdot b)}$$

Literaturverzeichnis

- [1] D.J. Amit. *Field Theory, the Renormalization Group, and Critical Phenomena*. World Scientific, 1984.
- [2] L. Balents and D.S. Fisher. Large- n expansion of $(4-\epsilon)$ -dimensional oriented manifolds in random media. *Phys. Rev. B*, 48(9):5949–5963, September 1993.
- [3] J.-P. Bouchaud and A. Georges. Competition between lattice pinning and impurity pinning: Variational theory and physical realization. *Phys. Rev. Lett.*, 68(26):3908–3911, June 1992.
- [4] S. T. Chui and J. D. Weeks. Phase transition in the two-dimensional coulomb gas, and the interfacial roughening transition. *Phys. Rev. B*, 14(11):4978, 1976.
- [5] S. T. Chui and J. D. Weeks. Dynamics of the roughening transition. *Phys. Rev. Lett.*, 40(12):733–736, March 1978.
- [6] D.S. Fisher. Random fields, random anisotropies, nonlinear σ models, and dimensional reduction. *Phys. Rev. B*, 31(11):7233–7251, June 1985.
- [7] D.S. Fisher. Interface fluctuations in disordered systems: $5 - \epsilon$ expansion and failure of dimensional reduction. *Phys. Rev. Lett.*, 56(18):1964–1967, May 1986.
- [8] S. Fishman and A. Aharony. Random field effect in disordered anisotropic antiferromagnets. *J. Phys. C*, 12:L729–L733, 1979.
- [9] G. Grinstein and S.-K. Ma. Roughening and lower dimension in the random-field ising model. *Phys. Rev. Lett.*, 49(9):685–688, 1982.
- [10] G. Grinstein and S.-K. Ma. Surface tension, roughening, and lower critical dimension in the random-field ising model. *Phys. Rev. B*, 28(5):2588–2601, 1983.
- [11] Y. Ito. Self-consistent calculations of statics and dynamics of the roughening transition. *Z. Phys. B*, 32:75–82, 1978.
- [12] M. Kardar. Domain walls subject to quenched impurities (invited). *J. Appl. Phys.*, 61(8):3601–3604, April 1987.

LITERATURVERZEICHNIS

- [13] J. Kierfeld. Zur Existenz der Vortex-Glasphase in Schichtsystemen. Diplomarbeit, Universität zu Köln, 1993.
- [14] L.D. Landau und E.M. Lifschitz. *Statistische Physik Teil I*. Akademie-Verlag Berlin, 1987.
- [15] A.I. Larkin. Effect of inhomogenities in the structur of the mixed state of superconductors. *JETP*, 31(4):784–786, October 70.
- [16] H. Leschhorn. *Grenzflächen in ungeordneten Medien*. Dissertation, Ruhr-Universität Bochum, 1994.
- [17] M. Mentzel. unveröffentlicht.
- [18] T. Natterman. The incommensurate-commensurate transition in a random-field model. *J. Phys. C*, 16:4113–4124, 1983.
- [19] T. Nattermann. unveröffentlicht.
- [20] T. Nattermann. On the stiffnes of the random field ising modell. *Z. Phys. B*, 54:247–252, 1984.
- [21] T. Nattermann. Some remarks on the random field ising modell on a lattice. *phys. stat. sol (b)*, 132:125–131, 1985.
- [22] T. Nattermann. Interface roughntning in systems with quenched random impurities. *Europhys. Lett.*, 4(11):1241–1246, 1987.
- [23] T. Nattermann and H. Leschhorn. Interfaces and directed polymers in disordered systems: a three-parameter renormalization group approach. *Europhys. Lett.*, 16(6):603–608, 1991.
- [24] P. Nozières. Shape and growth of crystals. In C. Godrèche, editor, *Solids Far From Equilibrium*. , 1991.
- [25] T. Tamaribuchi T. Sakaguchi and S. Takada. A self-consistent treatment of the kosterlitz-thouless transition of the two-dimensional classical sine-gordon model. *Progress of Theoretical Physics*, 68(1):19–28, 1982.